

# ESTUDO DE PROPRIEDADES ELÉTRICAS DE SISTEMAS MOLECULARES USANDO UM MÉTODO DE INTERAÇÃO DE CONFIGURAÇÕES MULTI-REFERÊNCIA

Luiz A. C. Malbouisson, M. B. Martinez

*Instituto de Física, UFBA, Campus Universitário de Ondina, Salvador, Bahia*

Nilo Makiuchi

*Instituto de Física, UnB, Asa Norte, Brasília, DF*

Utilizando-se um Método de Interação de Configurações Multi-referência, construído com diversas soluções HF (de uma mesma classe de simetria de ponto e spin) como referências (MRHF CI), é feito um estudo sobre momentos multipolares e propriedades elétricas das moléculas CO, H<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>, H<sub>3</sub><sup>+</sup>, LiH e BH, no estado fundamental.

O método foi aplicado anteriormente no cálculo do momento de dipolo dos sistemas BH, FH e LiH com base atômica mínima obtendo-se funções de estado que dão, com um reduzido número de configurações, energias comparáveis às do cálculo CI-completo na mesma base atômica e fornecem valores para o momento de dipolo com desvios dos resultados experimentais da mesma ordem que os obtidos por uma variedade de métodos e cálculos recentes.

Neste trabalho estamos estendendo estas aplicações para novos sistemas (CO e H<sub>2</sub>O na base mínima - H<sub>2</sub> e H<sub>3</sub><sup>+</sup> na base triple-zeta - LiH e BH na base double-zeta). Para os sistemas já estudados (LiH e BH na base mínima) estamos ampliando o conjunto das soluções HF utilizadas como referências nos cálculos MRHF CI anteriores.

---