



Universidade Federal do Rio de Janeiro

Programa de Engenharia Química - PEQ/COPPE

COQ 875 - Química Quântica de Moléculas e Sólidos | 2026.2

Lista 04 - Método de Hartree-Fock

Prof. Elvis Soares

Data de Entrega: 26/8/26

1. **Bases gaussianas:** As funções de base gaussianas primitivas são definidas como sendo

$$\phi_{nlm}^{\text{GTO}}(\mathbf{r}) = \mathcal{N} r^{n-1} e^{-\alpha r^2} Y_{lm}(\theta, \phi)$$

onde $\mathcal{N}$ é uma constante de normalização e n, l, m são os números quânticos referentes aos orbitais atômicos.

- (a) Determine a constante de normalização $\mathcal{N}$ do orbital 1s gaussiano.
- (b) Mostre que o produto de dois orbitais gaussianos 1s distintos centralizados em $\mathbf{R}_A$ e $\mathbf{R}_B$ pode ser escrito como um novo orbital gaussiano 1s centralizado em $\mathbf{R}_P$ na seguinte forma

$$\phi_{1s}^{\text{GTO}}(\alpha, \mathbf{r} - \mathbf{R}_A) \phi_{1s}^{\text{GTO}}(\beta, \mathbf{r} - \mathbf{R}_B) = K_{AB} \phi_{1s}^{\text{GTO}}(p, \mathbf{r} - \mathbf{R}_P)$$

e escreva os termos K_{AB} , p e $\mathbf{R}_P$ como função das variáveis α , β , $\mathbf{R}_A$ e $\mathbf{R}_B$.

2. **Moléculas de 10 elétrons:** Usando como base os notebooks do capítulo *PySCF* e as geometrias das moléculas de 10 elétrons (CH_4 , NH_3 , H_2O e FH) como fornecidas na tabela abaixo

Molécula	compr. de ligação (Å)	ângulo de ligação
CH_4	1.085	109.47°
NH_3	1.012	106.67°
H_2O	0.957	104.52°
FH	0.917	-

Utilize os conjuntos de base STO-3G, 6-31G* e 6-31G** e o método *RHF* (Restricted Hartree-Fock) nos cálculos.

(a) Determine as energias totais das moléculas (em eV) e preencha os valores na tabela abaixo. Discuta os resultados obtidos.

Base	CH ₄	NH ₃	H ₂ O	FH
STO-3G				
6-31G*				
6-31G**				

(b) Determine as energias dos orbitais moleculares HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) (em eV) e preencha os valores na tabela abaixo. Discuta os resultados obtidos.

Base	CH ₄	NH ₃	H ₂ O	FH
STO-3G				
6-31G*				
6-31G**				

(c) Determine as energias dos orbitais moleculares LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) (em eV) e preencha os valores na tabela abaixo. Discuta os resultados obtidos.

Base	CH ₄	NH ₃	H ₂ O	FH
STO-3G				
6-31G*				
6-31G**				

(d) Usando o programa VESTA faça a visualização das estruturas moleculares obtidas nos cálculos anteriores. Escolha somente uma das bases utilizadas nos cálculos anteriores.