

## Dicas Sobre a Construção do Espaço Ativo em Cálculos Multiconfiguracionais: Um Estudo de Casos

Adalberto Vasconcelos Sanches de Araújo<sup>a</sup> (PG), Antonio Carlos Borin<sup>b</sup> (PQ),

*Universidade de São Paulo, Instituto de Química  
Av. Prof. Lineu Prestes 748, 05508-000, São Paulo, SP, Brazil  
(e-mail: [adalberto.araujo@usp.br](mailto:adalberto.araujo@usp.br)<sup>a</sup>, [ancborin@iq.usp.br](mailto:ancborin@iq.usp.br)<sup>b</sup>)*

Keywords: Métodos multiconfiguracionais, espaço ativo

### INTRODUÇÃO

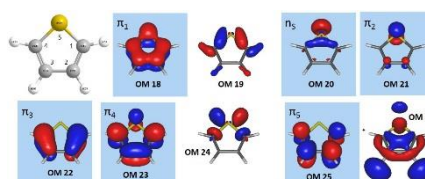
A escolha do espaço ativo é uma etapa fundamental para o sucesso de cálculos químico quânticos multiconfiguracionais. Embora sejam reconhecidamente necessários, a utilização destes métodos por iniciantes na área de química quântica computacional ainda está limitada, principalmente pelas dificuldades inerentes à etapa de construção do espaço ativo. Nesta contribuição, forneceremos algumas dicas para facilitar essa tarefa. Algumas situações corriqueiras serão apresentadas e discutidas, através de exemplos que poderão ser reproduzidos empregando-se softwares distribuídos gratuitamente. Pretendemos, assim, contribuir para a ampliação do uso destas poderosas ferramentas de cálculos.<sup>1</sup>

### MÉTODOS

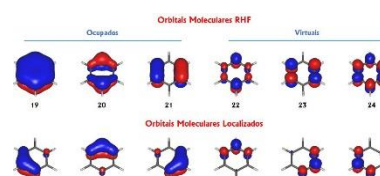
A discussão sobre a construção do espaço ativo foi feita empregando o método CASSCF. Os softwares utilizados foram o FIREFLY (semelhante do GAMESS) e MOLCAS. O MOLDEN e o GABEDIT foram empregados na visualização dos resultados. Os sistemas utilizados foram o etileno, o butadieno, o benzeno e o tiofeno.

### RESULTADOS E DISCUSSÕES

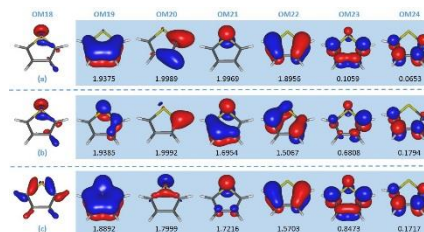
Dentre os aspectos abordados, destacamos a necessidade de colocar os orbitais na ordem correta e como isso é feito; discutimos as vantagens de se utilizar orbitais localizados ao invés dos orbitais canônicos como conjunto de orbitais iniciais; discutimos como analisar a estabilidade do espaço ativo em função do número de estados eletrônicos calculados; apresentamos um exemplo de como é feita a análise da função de onda com o intuito de identificar a natureza do estado eletrônico; apresentamos, também, as vantagens de se explorar a simetria molecular empregando teoria de grupos pontuais. Nas próximas Figuras, ilustramos alguns resultados obtidos.



**Figure 1.** Ilustração sobre a sequência correta dos orbitais moleculares.



**Figure 2.** Ilustração da diferença entre orbitais moleculares canônicos e localizados.



**Figure 3.** Discutindo a estabilidade do espaço ativo.

### CONCLUSÕES

Através dos exercícios propostos, ilustramos diversos aspectos práticos relacionados à escolha do espaço ativo em cálculos multiconfiguracionais. Esses exercícios podem ser utilizados em disciplinas de química quântica computacional, colocando o aluno em contato direto com esses importantes métodos de cálculo.

### AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem ao CNPq.

<sup>1</sup> A. C. Borin, A. V. S. de Araújo, Química Nova, 38, 738 (2015).