



COMPARAÇÃO ENTRE INFLUÊNCIA DA DICLOROMETANO E DO CLOROFÓRMIO NA OTIMIZAÇÃO DA MOLÉCULA $C_{19}H_{17}N_3O$

Ítalo Nuta Ribeiro^{1*} (PG), Clodoaldo Valverde¹ (PQ)

italonuta@gmail.com

¹ Universidade Estadual de Goiás Campus Anápolis de Ciências Exatas e Tecnológicas Henrique Santillo, Br 153 nº 3.105 - Anápolis – GO.

Resumo: Em busca de uma melhor compreensão de estruturas moleculares, são realizadas algumas simulações computacionais para verificar os efeitos que a molécula sofre ao ser otimizada em meio diferentes. Neste trabalho a molécula (E)-4-[(4-[(piridina-2-ilmetilideno) amino] fenil] amino) -metil] fenol $C_{19}H_{17}N_3O$ foi otimizada em meio com diclorometano e em meio com clorofórmio com o intuito de comparar os resultados obtidos, verificando a interferência do meio utilizado. A otimização foi realizada utilizando o método da Teoria do Funcional de Densidade, onde o funcional utilizado foi o b3lyp com um conjunto de funções de base 6-311 + G(d). Observou-se que o desvio padrão e a distância máxima entre as otimizações foi pequena e que a energia dos orbitais moleculares mais alto ocupados (HOMO) e dos orbitais moleculares mais baixo desocupados (LUMO) também houve pequena diferença. Conclui-se então que a influência que o meio diclorometano e o meio clorofórmio exercem sobre esta molécula são próximos.

Palavras-chave: Teoria do Funcional da Densidade, Orbital Molecular. Otimização.

Introdução

Para conseguir um melhor entendimento das estruturas geométrica e elétrica dos átomos, moléculas e sólidos, cálculos ab initio são bastante utilizados, pois são capazes de produzir bons resultados resolvendo a equação de Schrodinger considerando algumas aproximações. A teoria do funcional da densidade (DFT) é um método ab initio que propõe soluções em função de uma densidade eletrônica $\rho(\vec{r})$. A DFT é muito utilizada pois consegue resolver o problema eletrônico descrevendo corretamente a interação eletrostática e o custo computacional é baixo comparado a outros métodos (ALMEIDA *et al*, 2017).

Será analisado a estrutura do cristal (E)-4-[(4-[(piridina-2-ilmetilideno)amino]fenil]amino)-metil]fenol $C_{19}H_{17}N_3O$ (EPAF) (Figura 1) (ISKENDEROV *et al*, 2018).

REALIZAÇÃO

PRG
Pró-Reitoria de
Graduação

PRP
Pró-Reitoria de
Pesquisa e
Pós-Graduação

PRE
Pró-Reitoria de
Extensão, Cultura e
Assuntos Estudantis



Universidade
Estadual de Goiás

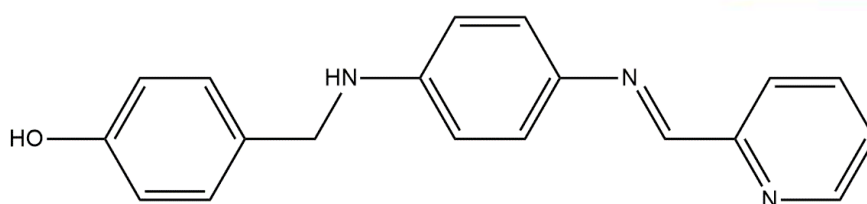


Figura 1: Estrutura do cristal EAPF

O cristal EAPF foi otimizado em meio com diclorometano e em seguida meio com clorofórmio, afim de verificar a interferência desses meios nas propriedades da molécula como sua estrutura molecular e as energias dos orbitais mais altos ocupados (HOMO) e dos orbitais mais baixos desocupados (LUMO).

Material e Métodos

Inicialmente, uma única molécula do cristal EAPF (Figura 2) foi isolada e em seguida os dados estruturais desta molécula foram levados primeiramente ao pacote de programas GAUSSIAN09, onde realizou-se a simulação computacional pela DFT. O funcional de densidade utilizado para a simulação foi o B3LYP com um conjunto de funções de base 6-311 + G(d) (CUSTÓDIO *et al*, 2018). A escolha desse conjunto de função base foi realizada devido a resultados satisfatórios obtidos anteriormente para sistemas similares.

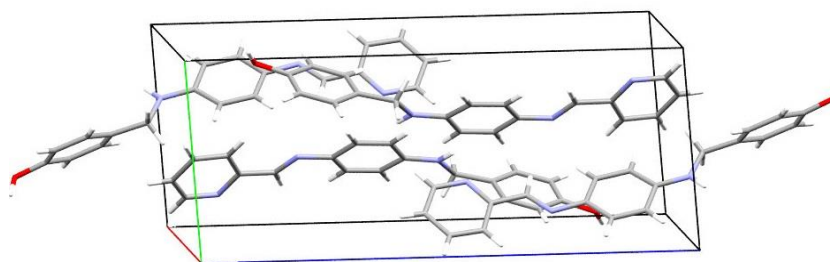


Figura 2: Cella unitária do cristal EAPF

Com o termino da otimização da molécula no meio diclorometano e depois em meio clorofórmio, foi realizado uma sobreposição entre a molécula otimizada em cada meio para verificar as diferenças que cada meio inferiu na estrutura. Após isso foi verificado as diferenças entre as energias do HOMO e do LUMO no meio com diclorometano e no meio com clorofórmio. Os cálculos foram realizados no cluster da Universidade Estadual de Goiás.

Resultados e Discussão

Após fazer a sobreposição entre os resultados (Figura 3), foi observado que o desvio padrão entre as estruturas foi de 0,0123Å e que a distância máxima entre a estrutura otimizada em cada meio foi de 0,0234Å.

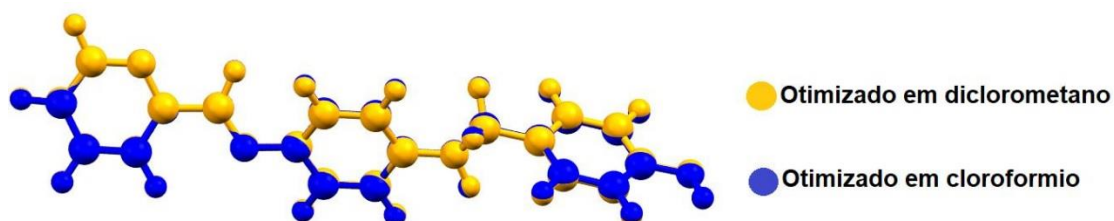


Figura 3: Sobreposição entre a estrutura otimizada em meio com diclorometano e clorofórmio

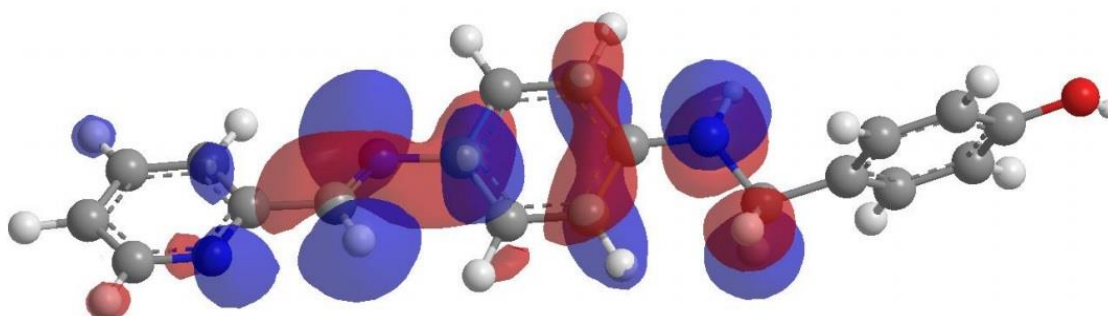


Figura 4: HOMO da molécula otimizada em meio com diclorometano.

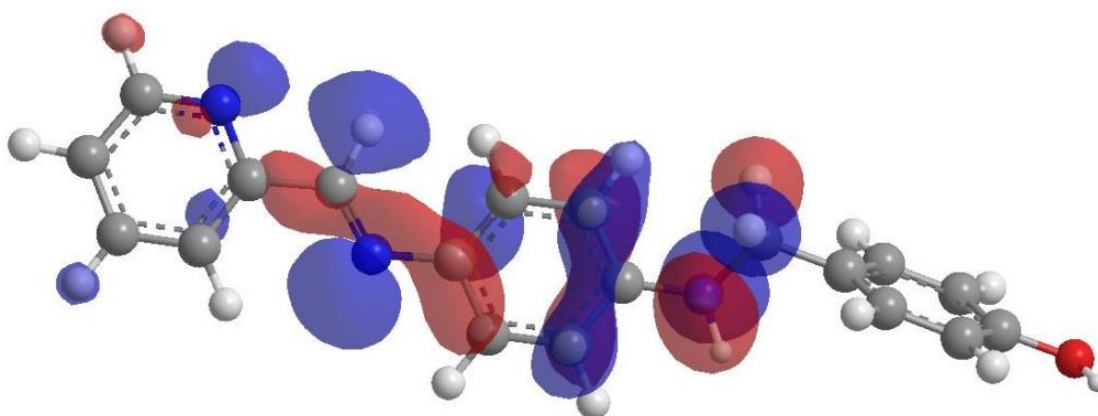


Figura 5: HOMO da molécula otimizada em meio com clorofórmio.

As energias do HOMO e do LUMO fornecem informações do caráter elétron-aceitador ou elétron-doador da molécula. Após os cálculos verificou-se que a energia do HOMO da molécula otimizada em meio com diclorometano (Figura 4) é de -9,207eV e a energia do HOMO da molécula otimizada em meio com clorofórmio (Figura 5) é de -9,194eV. Inserir as figuras e tabelas, caso necessárias, no espaço que achar conveniente.

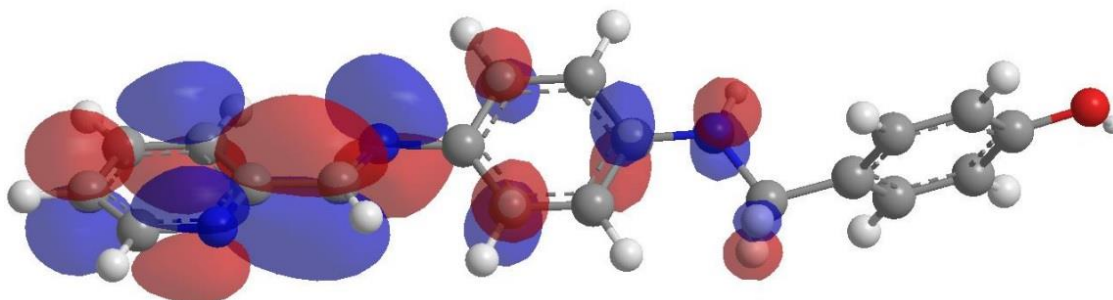


Figura 6: LUMO da molécula otimizada em meio com diclorometano.

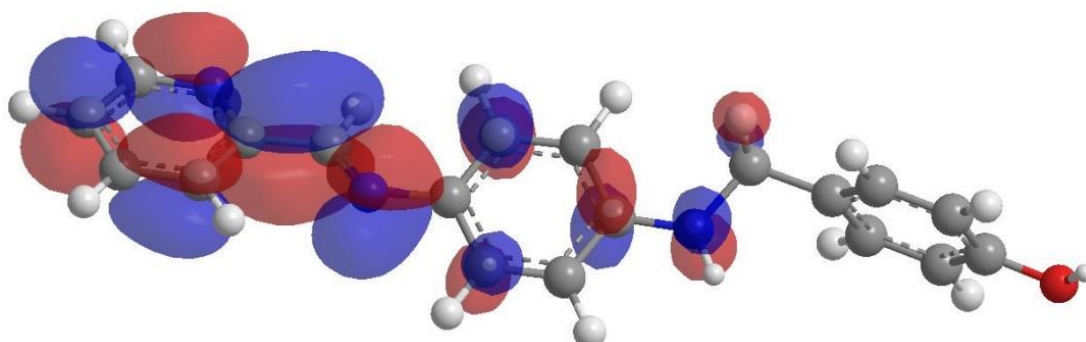


Figura 7: LUMO da molécula otimizada em meio com clorofórmio.

Verificou-se então que a energia do LUMO da molécula otimizada em meio com diclorometano (Figura 6) é de -3,759eV e a energia do LUMO da molécula otimizada em meio com clorofórmio (Figura 7) é de -3,748eV.

Considerações Finais

A diferença entre molécula do EPAF otimizada em meio com diclorometano e a mesma molécula otimizada em meio com clorofórmio foi pequena, como observado o desvio padrão e a distância máxima entre as duas otimizações.



Observando as propriedades elétricas da molécula EPAF, verificou-se que as energias do HOMO e do LUMO são semelhantes em ambas otimizações.

A energia de gap, que é a energia necessária para um fóton realize a transição do HOMO para o LUMO (RAUK, 2001), é obtida através da diferença LUMO-HOMO e seu valor para a otimização feita no meio com diclorometano é de 5,448eV e para a otimização realizada em meio com clorofórmio é de 5,446eV.

Pode-se concluir então que a influência que os meios com diclorometano e o clorofórmio tem sobre a estrutura da molécula EPAF são semelhantes e que para um fóton precisa ter um comprimento de onda de 364nm para migrar de um orbital para o outro na molécula otimizada em meio com diclorometano e 365nm para a molécula otimizada em meio com clorofórmio.

Agradecimentos

Primeiramente agradeço ao meu orientador professor Clodoaldo Valverde por toda atenção durante o trabalho realizado. Agradeço também a CAPES pela bolsa de estudos que permite realizar trabalhos e participar de eventos regionais, nacionais e internacionais. Aos meu familiares e amigos que me apoiam durante o mestrado em Ciências Moleculares.

Referências

ALMEIDA, L. R.; ANJOS, M. M.; RIBEIRO, G. C.; VALVERDE, C.; MACHADO, D. F. S.; OLIVEIRA, G. R.; NAPOLITANO, H. B.; OLIVEIRA, H. C. B. Synthesis, structural characterization and computational study of a novel amino chalcone: a potential nonlinear optical material. **New J. Chem.** V. 41, p. 1744-1754. 2017.

CUSTODIO, J.M.F. ; SANTOS, F.G. ; VAZ, W.F. ; CUNHA, C.E.P. ; SILVEIRA, R.G. ; ANJOS, M.M. ; CAMPOS, C.E.M. ; OLIVEIRA, G.R. ; MARTINS, F.T. ; DA SILVA, C.C. ; Valverde, C. ; Baseia, B. ; NAPOLITANO, H.B. . Molecular structure of hybrid iminochalcone in the solid state: X-ray diffraction, spectroscopy study and third-order nonlinear optical properties. **JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE.** v. 1157, p. 210-221, 2018.



ISKENDEROV, T. S.; FAIZI, S. H.; Dege N. Crystal structure and DFT study of (E)-4-[[({pyridin-2-ylmethylidene)amino}phenyl)amino)-methyl]phenol. **Acta Cryst E. ed Crystallographic Communications**, v. 74, n. 3, p.410-413, 2018.

RAUK, A. Orbital Interaction Theory of Organic Chemistry, **John Wiley & Sons**, New York, 2001.