



O efeito de Solvente na estrutura geométrica de cristal derivado de chalcona.

João Victor B. Soares¹ (PG)*, Clodoaldo Valverde^{1,2} (PQ)

joaosoaresueg@gmail.com

¹ Campus de Ciências Exatas e Tecnológicas, Universidade Estadual de Goiás, BR 153, km 98, 75.132-903 Anápolis, GO, Brazil.

² Universidade Paulista, Rodovia BR 153, Km 503, s/n - Fazenda Botafogo, 74845-090, Goiânia - GO.

Resumo: A busca por compostos que apresentam propriedades ópticas não lineares tem movimentado bastante centros de pesquisa. Esse fator se deve a aplicação tecnológica na área da fotônica, com o desenvolvimento de dispositivos com processamento de alta velocidade. No presente trabalho foi estudado o efeito do solvente sobre a estrutura geométrica do composto (2E) -3- (3-metilfenil) -1- (4-nitrofenil) prop-2-en-1-ona (3MPNP). Utilizamos o Modelo de Polarização Contínua (PCM) que trata o solvente por meio de constantes dielétricas (ϵ). Este método apresenta resultados bons em diferentes aplicações de óptica não linear. As propriedades elétricas estáticas e dinâmicas de uma molécula isolada (3MPNP) quando incorporadas em meio solvente apresentam alterações importantes, para estudar os efeitos do solvente sobre o momento dipolar das médias, polarizabilidade linear, primeira e segunda hiperpolarizabilidade, nós consideramos vários solventes. O cristal também foi estudado na fase gás. Os cálculos foram realizados numericamente com base no método dos campos finitos, O cristal (3MPNP) foi otimizado através do método de DTF (Teoria do Funcional Densidade) com o uso do funcional B3LYP na base 6-311+G(d).

Palavras-chave: Estrutura geométrica. Fase Gás. Solventes.

Introdução

Neste trabalho estudamos o efeito de solvente sobre a estrutura geométrica do composto (2E) -3- (3-metilfenil) -1- (4-nitrofenil) prop-2-en-1-ona (3MPNP), com fórmula molecular $C_{16}H_{13}NO_3$, em que o composto foi sintetizado e cristalizado por Shobha R. Prabhu et al (PRABHU *et al*, 2017). Utilizamos o Modelo de polarização Contínua (PCM) (CASTRO *et al*, 2016; SANTOS *et al*, 2015) que trata o solvente por

meio de constantes dielétricas (ϵ). Este método encontrou apresenta bons resultados em aplicações no campo da fotônica (BOYD, 2008; RIBEIRO *et al*, 2016). As propriedades elétricas estáticas e dinâmicas de uma molécula isolada (3MPNP) quando incorporadas em meio solvente apresentam alterações importantes, para estudar os efeitos do solvente sobre o momento de dipolo, polarizabilidade linear, primeira e segunda hiperpolarizabilidade consideramos os meios solventes: fase gás ($\epsilon = 1,00$), clorofórmio ($\epsilon = 4,71$), diclorometano ($\epsilon = 8,93$), acetona ($\epsilon = 20,49$), etanol ($\epsilon = 24,85$), metanol ($\epsilon = 32,61$), dimetilsulfóxido ($\epsilon = 46,70$), água ($\epsilon = 78,36$) e onde ϵ é a constante dielétrica do meio (FONSECA *et al*, 2010). Os cálculos foram realizados numericamente com base no método dos campos finitos e usando o nível de teoria B3LYP / 6-311 + G (d) (VIANNA *et al*, 2004; ORIO *et al*, 2009).

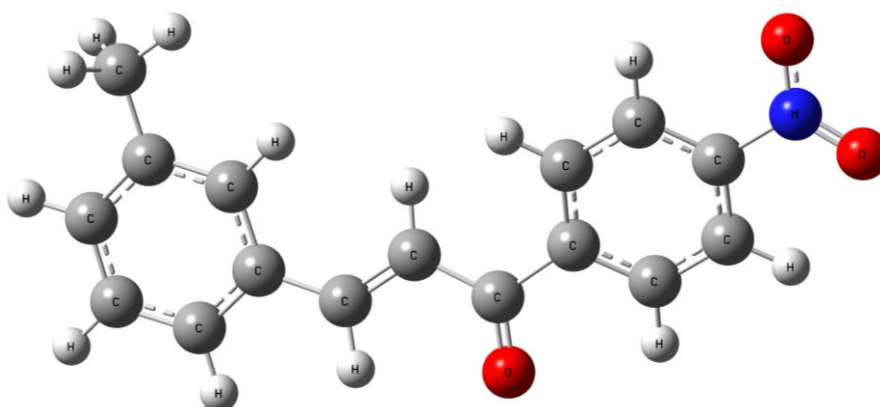


Figura 1: Estrutura molecular da (2E) -3- (3-metilfenil) -1- (4-nitrofenil) prop-2-en-1-ona (3MPNP).

Resultados e Discussão

Os cálculos foram realizados numericamente utilizando a teoria do funcional densidade. A figura 2 mostra a sobreposição da estrutura da molécula de cristal com a molécula na fase gasosa da molécula 3MPNP; a geometria utilizada para o ponto de ancoragem foi C7-C8-C9 (ver Figura 2). O desvio médio quadrático (RMSD) foi calculado entre a estrutura de raios X e a estrutura da fase gasosa; os átomos de hidrogênio foram desprezados em vista de suas incertezas no refinamento da posição dos raios X. A molécula de 3MPNP mostra em RMSD = 0,1499 max. d = 0,2871 Å. O

parâmetro RMSD indica um pequeno desvio entre os dados teóricos através da fase gasosa e dos dados experimentais.

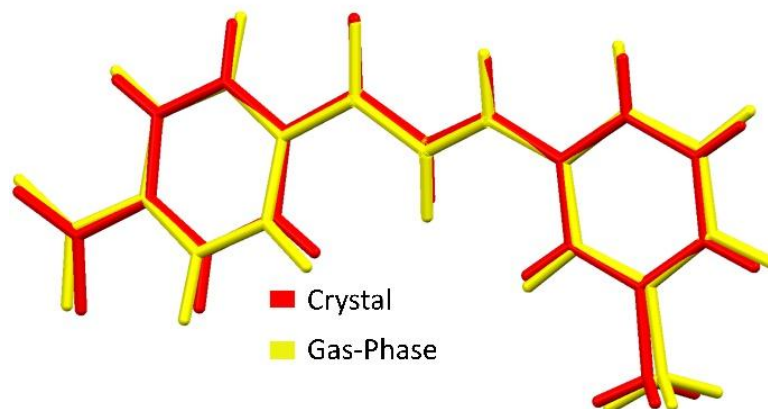


Figura 2: Overlay do composto, vermelho (cristal), amarelo (fase gasosa).

Considerações Finais

Nota-se que a variação dos valores dos parâmetros elétricos nos mostra um aumento bem definido com o aumento da constante dielétrica estática do meio solvente como observado na Tabela 1, naturalmente este fato ocorre porque a constante dielétrica elétrica também é uma função da frequência, $\varepsilon = \varepsilon(\omega)$.

Meio	μ	$\langle \alpha(0; 0) \rangle$	$\beta z(0; 0, 0)$	$\langle \gamma(0; 0, 0, 0) \rangle$
Fase gás	6.96	35.08	-3.22	122.43
Clorofórmio	8.25	43.93	-7.13	315.34
Diclorometano	8.49	45.96	-8.26	372.68
Acetona	8.65	47.46	-9.15	417.65
Etanol	8.67	47.69	-9.29	424.47
Metanol	8.70	47.94	-9.45	432.31



Dimetilsulfóxido	8.72	48.19	-9.60	440.16
Água	8.75	48.42	-9.75	447.61

Tabela 1: Resultados do momento de dipolo, polarizabilidade, primeira hiperpolarizabilidade e segunda hiperpolarizabilidade.

Agradecimentos

Os autores gostariam de agradecer às seguintes agências brasileiras de apoio financeiro: o Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), a Coordenação de Aperfeiçoamento Pessoal de Nível Superior (CAPES) e a Fundação de Apoio à Pesquisa do Estado de Goiás (FAPEG).

Referências

BOYD, R. W. **Nonlinear Optics**. 3. ed. New York: Elsevier/ Academic Press, 2008. 620 p.

CASTRO, A. N. *et al.* Theoretical study on the third-order nonlinear optical properties and structural characterization of 3-Acetyl-6-Bromocoumarin. **Chemical Physics Letters**, v. 653, p. 122–130, 2016.

FONSECA, T. L.; SABINO, J. R.; CASTRO, M. A.; GEORG H. C. A theoretical investigation of electric properties of L-arginine phosphate monohydrate including environment polarization effects. **Journal Chemical Physics**, v. 133, 144103-1-8, 2010.

PRABHU, S. R. *et al.* Synthesis, growth, structural characterization, Hirshfeld analysis and nonlinear optical studies of a methyl substituted chalcone. **Journal of Molecular Structure**, v. 1136, p. 244–252, 2017.

RIBEIRO, G. C. *et al.* 2016. Polarization effects on the third order nonlinear optical properties of two polymorphs of enamine derivative. **Theoretical Chemistry Accounts**.



V Congresso de Ensino,
Pesquisa e Extensão da UEG



VIANNA, J. D. M.; FAZZIO, A.; CANUTO, S. **Teoria Quântica de Moléculas e Sólidos: Simulação Computacional. São Paulo: Livraria da Física, 2004. 401 p.**

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