

Análise de coordenadas normais do *trans*-ácido fórmico

Marcelo de Sousa^{1*} (PG), Yoshiuky Hase¹ (PQ)

¹DFQ-IQ-UNICAMP, CP 6154, CEP 13084-862, Campinas, SP.

*sousa@iqm.unicamp.br

Palavras Chave: ácido fórmico, energia potencial, frequências fundamentais

Introdução

A análise de coordenadas normais, completa, do *trans*-ácido fórmico foi estudada por Redington¹ utilizando as frequências fundamentais de 24 moléculas isotópicas. Entretanto, o ajuste de campo de força foi realizado retendo várias constantes de força com valores fixos.

Neste trabalho, apresentamos uma nova tentativa de análise de coordenadas normais do *trans*-ácido fórmico, liberando constantes de força o máximo possível no ajuste de valores no procedimento dos quadrados mínimos. Os resultados obtidos mostram diferenças significativas nas várias constantes de interações.

Resultados e Discussão

Os cálculos foram feitos em princípio da mesma maneira que o de Redington¹, usando frequências fundamentais de 24 moléculas isotópicas como referência. Dos 31 valores de constantes de força, para o campo de força de simetria, foi possível ajustar simultaneamente 25 constantes de força neste trabalho. O número de liberação é bem maior comparando com o melhor cálculo de Redington, o qual conseguiu liberar apenas 12 constantes.

A tabela a seguir mostra as diferenças principais entre as constantes de força de Redington e as deste trabalho. As unidades estão em md/Å para estiramentos e md/Å² para deformações de ângulo.

Nos cálculos iniciais houve dificuldade no ajuste de constantes de força principais de C=O, C-O e OCO. Estas constantes, como pode ser visto na tabela, são sensíveis aos valores de alguns termos de interações, significando que o ajuste simultâneo destas constantes de força dependentes é importante.

Com o campo de força obtido as diferenças de frequências fundamentais, observadas e calculadas, diminuíram bastante comparando com o trabalho anterior. Em relação à distribuição de energia potencial não há grandes diferenças nas tendências dos modos normais.

O cálculo da média das frequências do trabalho de Redington foi de 6,1463, enquanto que a deste trabalho foi de 4,6089.

30^o Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Campos de Força de Simetria

	Redington	Neste trabalho
F(O-H,C=O)	-0,449	1,284
F(O-H,C-O)	1,806	0,806
F(C-H,COH)	-0,566	-0,065
F(C=O,COH)	0,133	-0,468
F(C=O,OCO)	0,553	1,041
F(C=O,C-O)	-0,098	0,229
F(C-H,C=O)	0,863	0,439
F(O-H,COH)	0,184	-0,325

Conclusões

Este trabalho mostrou que havia a necessidade do ajuste simultâneo do maior número possível de constantes de força. Isto também resultou em uma menor diferença nas frequências fundamentais observadas e calculadas.

Agradecimentos

O autor(M. S.) deste trabalho agradece ao CNPq pela bolsa de estudo concedida (processo 135177/2005-7).

I.R.L. Redington, *J.Mol. Spectry.* **65** 171 (1977)