

# MODELAGEM MOLECULAR DO TRIÓXIDO DE ARSÊNIO

Gabriel Costa Alverni da Hora\*<sup>1</sup> (IC), João Bosco Paraíso da Silva<sup>1</sup> (PQ), Ricardo Luiz Longo<sup>1</sup> (PQ)

1 - Departamento de Química Fundamental, CCEN, UFPE. Av. Prof. Luiz Freire s/n – Cidade Universitária, Recife-PE – CEP : 50740-540 \*gabrielcostinha@gmail.com

Palavras Chave:  $As_2O_3$ , DFT, MP2, análise conformacional

## Introdução

A modelagem molecular dos óxidos de arsênio é relevante devido às suas aplicações na química de semicondutores e na química biológica. Por exemplo, trióxido de arsênio é formado como impureza na superfície de semicondutores de GaAs quando estes são tratados com ácidos de Brönsted. [1] Por outro lado, trióxido de arsênio tem sido usado, com sucesso, no tratamento de alguns tipos de câncer [2].

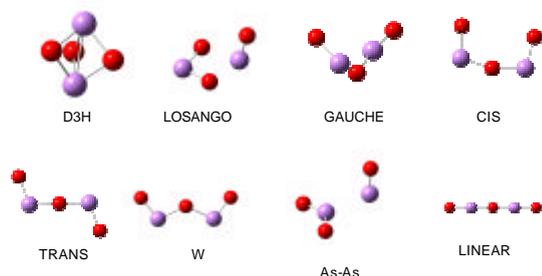
Enquanto que o gás e o sólido  $As_4O_6$  estão caracterizados, pouco é conhecido sobre o gás  $As_2O_3$ . Logo, obter mais informações estruturais e energéticas sobre este óxido de arsênio será importante para estabelecer e ampliar seus estudos e aplicações tanto na área de materiais como de biologia molecular. Neste trabalho, cálculos DFT-B3PW91 e MP2 com os conjuntos de funções de base 6-31+G(d) e 6-311+G(3df) foram realizados com o programa Gaussian03 para as mais variadas formas do gás  $As_2O_3$ .

## Resultados e Discussão

Uma busca conformacional sistemática, envolvendo a otimização completa da estrutura molecular, forneceu oito estruturas para o gás  $As_2O_3$  ilustradas na Figura 1.

**Figura 1** – As oito conformações do gás  $As_2O_3$ .

As frequências vibracionais harmônicas e suas



intensidades no infravermelho foram também calculadas para as oito conformações. A energia relativa ao conformero mais estável e a menor frequência vibracional estão apresentadas na Tabela 1. As frequências vibracionais também foram utilizadas para realizar as correções de energia de ponto zero (ZPE).

**Tabela 1:** Energia relativa incluindo a correção ZPE ( $\text{kJ mol}^{-1}$ ) e a menor frequência vibracional ( $\text{cm}^{-1}$ ), em parênteses, das conformações de  $As_2O_3$ .

Conformação	B3PW91/ Base-1 <sup>a)</sup>	B3PW91/ Base-2 <sup>b)</sup>	MP2/ Base-2 <sup>b)</sup>
D3H	0 (393,7)	0 (365,5)	0 (363,8)
Losango	42,20 (156,0)	32,97 (124,5)	17,40 (118,1)
Gauche	72,79 (-76,4)	43,79 (34,9)	20,68 (47,3)
Cis	76,18 (-6,39)	54,11 (-72,4)	27,96 (-61,1)
Trans	68,25 (-55,3)	58,16 (-101,3)	37,23 (-102,3)
W	NO <sup>c)</sup>	61,24 (-22,4)	37,41 (21,2)
As-As	258,46 (-28,7)	247,74 (-13,9)	234,75 (-24,4)
Linear	446,91 (-459,7)	474,14 (-595,7)	378,86 (-465,2)

<sup>a)</sup>Base-1 = 6-31+G(d); <sup>b)</sup>Base-2 = 6-311+G(3df); Energia total + correção ZPE do D3H =  $-4693,117915 E_h$  (B3PW91/Base-1);  $-4697,396023 E_h$  (B3PW91/Base-2);  $-4693,980866 E_h$  (MP2/Base-2); <sup>c)</sup>NO = não otimizou a estrutura.

A conformação D3H é a mais estável. Quatro conformações não correspondem a pontos de mínimo na superfície de energia potencial, mas, possivelmente, aos estados de transições para conversões entre as conformações. Do ponto de vista quantitativo, a estabilidade dos conformeros aumenta quando o conjunto de base é aprimorado de 6-31+G(d) para 6-311+G(3df) e também quando o método DFT-B3PW91 é substituído pelo método MP2.

## Conclusões

Há somente quatro estruturas estáveis: D3H, losango, gauche e W. As energias relativas são pequenas o suficiente para que sejam termicamente acessíveis. Entretanto, são necessários os cálculos das barreiras para determinar se são cineticamente acessíveis.

## Agradecimentos

ProAcad/UFPE, FACEPE e CNPq.

<sup>1</sup> Lockwood, D.J., *J. Solution Chemistry*, **2000**, 29, 1039-1046.

