

ESTUDO DE PRIMEIROS PRINCÍPOS DE PROPRIEDADES ELETRÔNICAS E ESPECTROSCÓPICAS DE ORGANOCALCOGÊNIOS.

Aline V. Henkes^{1*} (IC), Paulo C. Piquini² (PQ), Marcos A. Villetti² (PQ), Adriane Sperança¹(PG).

* aline_henkes@yahoo.com.br

¹ Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria – RS.

² Departamento de Física, Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria – RS

Palavras Chave: Simulação. Espectroscopia. TDDFT

Introdução

A simulação computacional em química atua como instrumento de apoio na análise, previsão, interpretação e validação dos dados experimentais.

Neste trabalho realizamos: (i) um teste da metodologia teórica utilizada e (ii) uma comparação dados espectroscópicos (UV/Vis) experimentais com resultados teóricos simulados. Os compostos estudados (Figura 1) são organocalcogênicos que possuem possível potencial antioxidante¹ devido ao núcleo S-Cromeno. Isso foi feito para que possamos definir uma metodologia adequada ao estudo deste tipo de compostos.

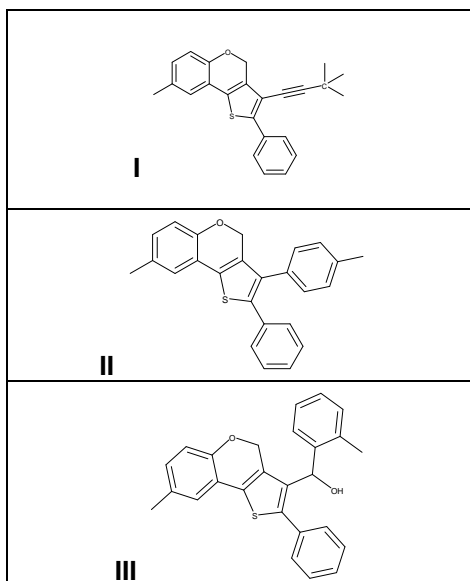


Figura 1. Estrutura molecular das moléculas organocalcogênicas estudadas.

O programa computacional GAMESS foi utilizado para a simulação dos espectros teóricos. A Teoria do Funcional da Densidade Dependente do Tempo² (TDDFT) foi empregada para a obtenção das energias de excitação e das intensidades das transições eletrônicas.

Resultados e Discussão

Algumas combinações de funcionais de troca-correlação (f_{XC}) e funções de base (f_{BASE}) foram testadas e seus desempenhos em reproduzir os resultados experimentais foi analisado.

As combinações f_{XC}/f_{BASE} testadas foram: SVWN/6-31G*, BLYP/6-31G*, BP86/6-31G*, PBE/6-31G*, B3LYP/6-31G*, B3LYP/DZV e B3LYP/TZV.

A combinação f_{XC}/f_{BASE} que de maneira universal melhor reproduziu os dados espectroscópicos das moléculas de I a III foi a combinação B3LYP/6-31G*, embora, a combinação B3LYP/DZV tenha apresentado resultados mais satisfatórios para a molécula II.

A tabela 1 mostra os comprimentos de onda (λ) de absorção calculados e os valores experimentais para as moléculas I, II e III e os orbitais moleculares envolvidos nas transições eletrônicas.

Tabela 1. Comprimento de onda experimental e calculado para as moléculas I, II e III, e orbitais moleculares envolvidos nas transições eletrônicas.

Molécula	λ experimental (nm)	λ teórico (nm)	Orbitais envolvidos nas transições eletrônicas
I	230	241,6	HOMO→LUMO
	318	312,2	HOMO-1→LUMO
	370	369,7	HOMO-1→LUM+1
II	245	248,3	HOMO→LUMO
	308	283	HOMO-2→LUMO
	352	365,2	HOMO-1→LUMO+1
III	246	288,3	HOMO-1→LUMO
	302	334,7	HOMO→LUMO+5
	345	352,2	HOMO-2→LUMO

Conclusões

Os resultados obtidos apresentam uma correlação bastante satisfatória com os dados experimentais. Determinamos que a combinação funcional/base dada por B3LYP/6-31G* é adequada para o tratamento de sistemas organocalcogênicos.

Agradecimentos

FAPERGS, CESUP.

¹ Gonzales, J. L. et al. *European Journal of Medicinal Chemistry*, v.42, p.552, 2007.

² Runge, E.; Gross, E.K. U.; Density-Functional Theory for Time-Dependent Systems, *Physical Review Letters*, v. 52, p. 997-1000, 1984.