

## Avaliação de metodologias teóricas para o estudo de polímeros.

Samuel S. Oliveira (IC)<sup>1</sup>, Paula Homem-de-Mello (PQ)\*<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ABCSim, Centro de Ciências Naturais e Humanas - Universidade Federal do ABC, Santo André, SP.

\*paula.mello@ufabc.edu.br

Palavras Chave: DFT, poliacetileno

### Introdução

Os primeiros passos para criação de polímeros condutores aconteceu por volta dos anos 50 com os polímeros condutores extrínsecos. Recentemente, outra classe de materiais condutores, os “polímeros condutores intrínsecos”, têm uso em diversas aplicações devido as suas propriedades específicas na condutividade elétrica<sup>1</sup>.

Para que se possam melhorar as propriedades dos polímeros condutores, é fundamental um melhor entendimento das suas propriedades. Em virtude disto, a simulação de moléculas de polímeros com diversos métodos da química quântica tem crescido de importância<sup>2</sup>.

### Resultados e Discussão

Sendo a DFT (Teoria do Funcional da Densidade) um dos métodos mais utilizados atualmente, neste trabalho, procurou-se comparar dois funcionais e duas bases para o estudo do monômero, dímero e trímero do poliacetileno. Este é um passo importante, uma vez que pretende-se estudar a interação de cadeias longas de poliacetileno. Por se tratar de um sistema grande, é desejável utilizar bases pequenas. Por outro lado, deseja-se utilizar a correção para interações de dispersão implementada no programa CPMD apenas para o funcional BLYP.

Assim, neste trabalho foram feitos cálculos de otimização de geometria e de frequência (para assegurar que as geometrias obtidas se tratam de mínimos na superfície de energia potencial) com as bases 6-31G, 6-311G, 6-311G(d) e 6-311G(d,p) e os funcionais B3LYP (B3) e BLYP (B) para verificar se há diferenças significativas nas propriedades eletrônicas.

As Tabelas 1 e 2 apresentam alguns dos resultados obtidos. O tamanho da base não influencia nos resultados e a energia eletrônica total cresce conforme o tamanho da cadeia é aumentado, como esperado. O dipolo é apenas ligeiramente afetado pela mudança de metodologia. Entretanto, as energias de HOMO e LUMO sofrem maiores alterações.

**Tabela 1.** Resultados dos cálculos para o monômero de acetileno

	$E_T$ (u.a.)	Dipolo (Debye)	$E_{HOMO}$ (u.a.)	$E_{LUMO}$ (u.a.)
B3 / 6-311 G (d,p)	-78,614	0,0010	-0,277	0,003
B3 / 6-311 G (d)	-78,606	0,0010	-0,276	0,005
B / 6-311 G (d,p)	-78,566	0,0005	-0,236	-0,024
B / 6-311 G (d)	-78,559	0,0005	-0,235	-0,022

**Tabela 2.** Resultados dos cálculos para o dímero de acetileno

	$E_T$ (u.a.)	Dipolo (Debye)	$E_{HOMO}$ (u.a.)	$E_{LUMO}$ (u.a.)
B3/6-311G (d)	-156,028	0,0005	-0,238	-0,032
B/6-311 G (d)	-155,944	0,0003	-0,202	-0,057
B/6-311G(d,p)	-155,900	0,0002	-0,191	-0,046

### Conclusões

As metodologias utilizadas fornecem resultados muito semelhantes, indicando que é possível a utilizar a menos custosa para o estudo de moléculas maiores. Entretanto, ainda estão em andamento cálculos para verificar as energias dos orbitais de fronteira.

### Agradecimentos

À FAPESP e à UFABC.

<sup>1</sup>Faez, R. et. al., QUÍMICA NOVA NA ESCOLA 2000 (11) 13.

<sup>2</sup>GALIATSATOS, V. Molecular simulation methods for predicting polymer properties. Hoboken, N.J: Wiley-Interscience