

Uso da função B3LYP e dos métodos semiempírico e *ab initio* para gerar e analisar elpots em compostos orgânicos

Eriosvaldo Florentino Gusmão^{1*} (IC) Anestor dos Santos Machado Neto¹ (IC) João Paulo Ferraz de Souza¹ (IC) Maria Suely Costa da Câmara¹ (PQ). *eriosvaldo.gusmao@gmail.com*.

1* - Unidade Acadêmica de Serra Talhada - UFRPE/UAST

Palavras Chave: superfície de potencial eletrostático, elpot, semiempírico, *ab initio*, B3LYP.

Introdução

Uma importante propriedade no estudo de moléculas é o potencial eletrostático, as superfícies também conhecidas como elpot (eletrostatic potential), são obtidas em cálculos computacionais a partir de determinadas posições fixas e as prováveis posições dos elétrons. A saída do cálculo é normalmente representada por uma superfície de isodensidade, uma superfície onde a densidade eletrônica total é constante¹. As interações eletrostáticas são fundamentais para as propriedades das moléculas orgânicas. As superfícies de potencial eletrostático são justamente o foco de interesse desse trabalho, pois estas estruturas são encontradas em diversos livros de química orgânica, assim como de química geral, inorgânica e em alguns de química em nível de ensino médio. Esses livros, no entanto, usam esses mapas na grande maioria das vezes como um recurso didático, visto que geralmente os recursos visuais dos elpot são bastante chamativos, sem tratar de modo mais profundo a relação entre esses mapas de superfície e a atividade das moléculas. Usaremos, para modelar um grupo de ácidos carboxílicos, os métodos semiempírico (SE), *ab initio* (AI) e density functional theory (DFT), com a função de base introduzida por Axel Becke nos parâmetros Lee-Yang-Parr (B3LYP)², obtendo suas superfícies de potencial, para que os alunos de monitoria das disciplinas de química orgânica da UAST aprendam a correlacioná-las com as atividades dessas moléculas, compreendendo melhor sua reatividade e as propriedades dos ácidos estudados em termos de estruturas eletrônicas.


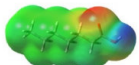

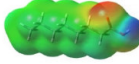

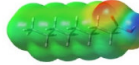

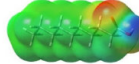

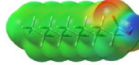

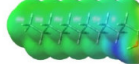
Resultados e Discussão

Os mapas de potencial eletrostáticos na tabela 1 foram obtidos pelos cálculos em múltiplas etapas usando os métodos SE e AI correlacionados com a função B3LYP, que apresenta alta eficiência para este tipo de calculo. Embora os elpots sejam bastante similares, as diferenças podem ser observadas devido à variação das cores e de suas intensidades em diferentes regiões das moléculas, assim como entre as moléculas. As diferenças conformacionais e o efeito das induções eletrônicas são claramente responsáveis pelas alterações. Ao observar as estruturas os alunos puderam comparar e constatar a similaridade entre o elpots dos ácidos que vão do etanóico ao undecanóico, as mesmas similaridades que os tornaram diferentes dos outros dois ácidos analisados, e assim compreender a

34^a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

relação entre a estrutura eletrônica e o ponto de ebulição (*Pe*). Observaram que os pontos de ebulição dos ácidos em graus Celcius (C) variam gradulmente do etanóico (118^o C) ao undecanóico (284^o C), e que estes apresentaram-se próximos, já o dodecanóico possui um ligeiro decrescimo, apresentado *Pe* mais baixo, no valor de (225^o C), indicio de que sua reatividade também está também distanciada da dos demais.

Tabela 1. Elpots calculados pelo Gaussian e geradas pelo GaussView 03.

Ácidos	Elpot	Ácidos	Elpot
Metanóico		Heptanóico	
Etanóico		Octanóico	
Propanóico		Nonanóico	
Butanóico		Decanóico	
Pentanóico		Undecanóico	
Hexanóico		Dodecanoico	

Conclusões

Através da associação dos cálculos semiempírico, *ab initio* e DFT usando a função B3LYP foi possível que os alunos correlacionassem os resultados em uma análise da relação estrutura eletrônica - propriedade física da série homóloga dos ácidos estudados.

Agradecimentos

Ao professor Dr. Kelson Mota Teixeira de Oliveira, da Universidade Federal do Amazonas, pelos programas Gaussian e GaussView e a UFRPE/UAST.

¹ Atkins, P.; Paula, J. de. 2010 *Physical chemistry* 9rd ed. New York, Oxford University Press **2010**, 9, 403.

² Paier, J.; Marsman, M. & Kresse, G. The Journal Of Chem. Phys. **2007**. [Online]