

Estudo Quanto-Mecânico de Interações Intermoleculares de compostos aromáticos

Max. N. Pereira¹ (IC), Leonardo. Baptista¹ (PQ) *

1- Universidade do Estado do Rio de Janeiro / Departamento de Química - Campus Resende - Rodovia Presidente Dutra km 298 - Polo Industrial - Resende - RJ. CEP: 27.537-000.

* E-mail: leobap@gmail.com

Palavras Chave: Compostos aromáticos, Ligação de hidrogênio, Interações atrativas, Equações de estado.

Abstract

Quantum mechanical study of intermolecular interactions of aromatics compounds. Theoretical study of intermolecular forces that acts in aromatics compounds to evaluate thermodynamics model.

Introdução e Metodologia

A determinação de propriedades termodinâmicas é de suma importância para o desenvolvimento de processos industriais e novos materiais. Os cálculos de tais propriedades requer conhecimento detalhado das interações intermoleculares do sistema. A forma mais precisa para descrever interações intermoleculares é pelo uso de métodos quanto-mecânicos rigorosos que são inaplicáveis para sistemas de interesse na indústria química.

Com este objetivo, equações de estado e simulações numéricas são aplicadas a fim de se obter parâmetros termodinâmicos desejados a partir de uma descrição aproximada das interações intermoleculares. Um método para descrição de fluidos associativos e equilíbrio de fases é o método SAFT, que trata as interações atrativas como interações localizadas e altamente direcionadas¹.

Um estudo mecânico quântico pode ser de grande avalia para fundamentar a descrição matemática do termo atrativo do método SAFT. Nesse sentido, o presente trabalho tem o objetivo de verificar se as considerações feitas dentro desta metodologia são coerentes e como podem ser melhoradas.

Adicionalmente, descrever por intermédio de métodos quanto-mecânicos, as interações intermoleculares e propriedades eletrônicas existentes em diferentes pares de moléculas de interesse para as indústrias petroquímicas de forma a validar as considerações feitas por equações de estado e métodos baseados em contribuição de grupo.

Resultados e Discussão

Os cálculos quânticos foram realizados com o programa Gaussian 09, utilizando métodos M06-2X e PBE1PBE. As energias foram recalculadas com o método CCSD(T) a fim de se obter uma boa descrição das forças intermoleculares. Os resultados para a interação frontal (ligação de hidrogênio e dipolo-dipolo) e empilhamento π foram

organizados na tabela 1. A formação da ligação de hidrogênio no fenol está ilustrada na figura 1.

Tabela 1: Valores de ΔE° corrigidos por BSSE em kcal mol⁻¹. Valores obtidos com a base 6-311G(d,p).

	Interação Frontal		Empilhamento π	
	M06-2x	PBE1PBE	M06-2x	PBE1PBE1
Anilina	-7.912	-8.541	2.384	2.263
Fenol	-5.415	-6.035	2.35	2.483
Nitrobenzeno	-4.895	-5.413	3.094	1.945

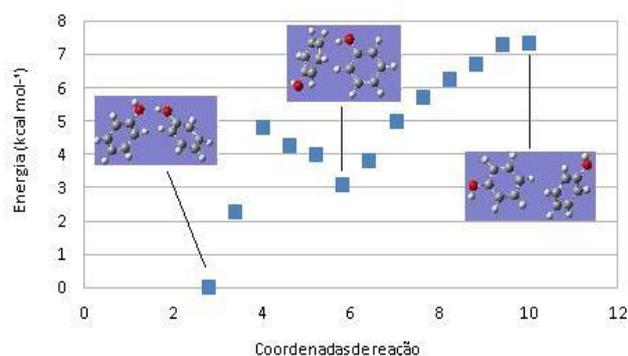


Figura 1. Gráfico da curva de formação do dímero de fenol via ligação de hidrogênio pelo método M06-2X/6-311G(d,p).

Conclusões e Perspectivas Futuras

Foram calculadas as energias de interações para as moléculas anilina, fenol e nitrobenzeno em duas configurações distintas, e posteriormente a curva de formação da ligação de hidrogênio no dímero de fenol. A interação frontal é da ordem 9-8 kcal.mol⁻¹ e majoritária em relação ao empilhamento π , como previsto. Todos os resultados estão sendo refinados em nível CCSD(T). A análise das propriedades eletrostáticas, forças intermoleculares e curvas para dimerização das moléculas estão sendo realizada a fim de verificar as hipóteses do método SAFT.

Agradecimentos

A CAPES, FAPERJ e CNPq.

[1] Silva-Oliver et al *Fluid Phase Equilibria* 250 (2006) 37–48.