

UM ESTUDO DA INFLUÊNCIA DOS SOLVENTES ÁGUA E ETANOL NAS PROPRIEDADES GEOMÉTRICAS DE UM DERIVADO DE PIRIDINA

CARVALHO, Ismael Rufino, VALVERDE, Clodoaldo
UNIVERSIDADE ESTADUAL DE GOIÁS
QUÍMICA LICENCIATURA

INTRODUÇÃO

Para conseguir um melhor entendimento das estruturas geométrica e elétrica dos átomos, moléculas e sólidos, cálculos *ab initio* são bastante utilizados, pois são capazes de produzir bons resultados resolvendo a equação de Schrodinger, considerando algumas aproximações. A teoria do funcional da densidade (DFT) é um método *ab initio* que propõe soluções em função de uma densidade eletrônica $\rho(r)$. A DFT é muito utilizada, visto que consegue resolver o problema eletrônico por meio de uma descrição concisa da interação eletrostática. Outrossim, o custo computacional é baixo, comparado a outros métodos. Será analisada a estrutura do cristal (E)-4-[[4-[[piridina-2-ilmetilideno)amino]fenil]amino]-metil]fenol (EPAF) (Figura 1) [1].

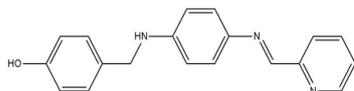


FIGURA 1: Estrutura do cristal EPAF
FONTE: Dados da pesquisa

O cristal EPAF foi otimizado em meio com água e, em seguida, com etanol, a fim de se verificar a interferência desses meios nas propriedades da molécula, além da sua estrutura, das energias dos orbitais mais altos ocupados (HOMO, sigla em inglês) e dos orbitais mais baixos desocupados (LUMO, sigla em inglês).

OBJETIVOS

Realizar análises computacionais, com o intuito de determinar algumas propriedades geométricas da estrutura (E)-4-[[4-[[piridina-2-ilmetilideno)amino]fenil]amino]-metil]fenol [1].

METODOLOGIA

Inicialmente, uma única molécula do cristal EPAF (Figura 2) foi isolada e, posteriormente, os dados estruturais desta molécula foram levados ao pacote de programas GAUSSIAN09, onde realizou-se a simulação computacional pela DFT. O funcional de densidade utilizado para a simulação foi o B3LYP com um conjunto de funções de base 6-311 + G(d) [2]. A escolha desse conjunto de função base foi realizada devido a resultados satisfatórios obtidos anteriormente para sistemas similares.

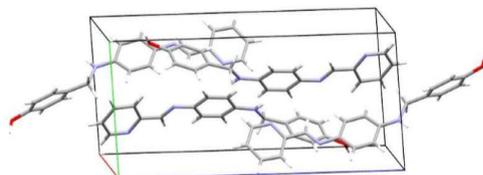


FIGURA 2: Célula unitária do cristal EPAF
FONTE: Dados da pesquisa.

Com o termino da otimização da molécula no meio água, e depois em meio etanol, realizou-se uma sobreposição entre a molécula otimizada em cada meio para verificar os impactos exercidos por eles na estrutura. Após, observaram-se as diferenças entre as energias do HOMO e do LUMO no meio com água e no meio com etanol. Os cálculos foram realizados no cluster da Universidade Estadual de Goiás.

RESULTADOS

Após feitas a sobreposição entre os resultados (Figura 3), constatou-se que o desvio padrão entre as estruturas foi de 0,0048 Å e que a distância máxima entre a estrutura otimizada em cada meio foi de 0,0093 Å

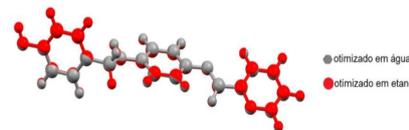


FIGURA 3: Sobreposição entre a estrutura otimizada em meio com água e etanol
FONTE: Dados da pesquisa

As energias do HOMO e do LUMO fornecem informações do caráter elétron-aceitador ou elétron-doador da molécula. Após os cálculos verificou-se que a energia do HOMO da molécula otimizada em meio com água (Figura 4) é de -9,228 eV e a energia do HOMO da molécula otimizada em meio com etanol (Figura 5) é de 9,221 eV

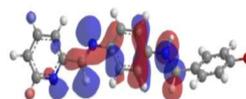


FIGURA 4: HOMO da molécula otimizada em meio com água.
FONTE: Dados da pesquisa

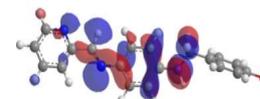


FIGURA 5: HOMO da molécula otimizada em meio com etanol.
FONTE: Dados da pesquisa

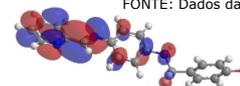


FIGURA 6: LUMO da molécula otimizada em meio com etanol
FONTE: Dados da pesquisa

Assinalou-se, então, que a energia do LUMO da molécula otimizada em meio com água (Figura 6) é de 3,776 eV e a energia do LUMO da molécula otimizada em meio com etanol (Figura 7) é de -3,770 eV.

REFERÊNCIAS

- ISKENDEROV, T. S.; FAIZI, S. H. Dege N. **Crystal structure and DFT study of (E)-4-[[pyridin-2ylmethylidene)amino]phenyl]amino)-methyl]phenol**. Acta Cryst E. ed Crystallographic Communications, v. 74, n. 3, p.410-413, 2018.
- RAUK, A. **Orbital Interaction Theory of Organic Chemistry**. John Wiley & Sons, New York, 2001.

AGRADECIMENTOS E FINANCIAMENTOS

Ao orientador Clodoaldo Valverde.