

E406

DETERMINAÇÃO DE CARGAS E DIPOLOS ATÔMICOS PARA MODELAR MOMENTOS DIPOLARES E INTENSIDADES VIBRACIONAIS NO INFRAVERMELHO DE MOLÉCULAS

Sérgio Henrique Dias Marques Faria (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Roy Edward Bruns (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

A estrutura eletrônica de uma molécula contém informações valiosas sobre suas propriedades. Esta estrutura pode ser representada por cargas atômicas. Uma maneira de melhorar a descrição da densidade eletrônica de uma molécula é adicionar dipolos atômicos às cargas atômicas. Planejamentos fatoriais 2^2 foram realizados para investigar os efeitos de mudanças das funções de base 6-31G(d,p) e 6-311++G(3d,3p) e mudanças no nível de tratamento de correlação eletrônica do nível Funcional de Densidade (B3LYP) para Teoria de Perturbação de Møller-Plesset de ordem 2 (MP2). Os cálculos foram realizados utilizando-se o programa Gaussian 98 e Chemomatrix. Mudanças de base e no nível de correlação eletrônica afetam mais os valores de carga do que os valores de dipolos atômicos para as moléculas NH_3 , HFCO e F_2CO , enquanto que esses fatores afetam mais os dipolos para o H_2CO . Para a carga do nitrogênio do NH_3 , a mudança de base resulta numa perda de $0,09 e^-$ na densidade eletrônica acerca desse átomo, mas não afeta o seu dipolo atômico. Os efeitos da função de base e do nível de tratamento de correlação eletrônica afetam as cargas e os dipolos dos átomos de carbono, oxigênio e flúor bem mais do que o átomo de hidrogênio. O planejamento fatorial se mostra ser uma ferramenta bastante útil na análise de mudanças nas estruturas eletrônicas destas moléculas.

Cargas - Dipolos Atômicos - Estrutura Eletrônica