

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  $\text{NH}_3$ , HFCO e  $\text{F}_2\text{CO}$ , enquanto que esses fatores afetam mais os dipolos para o  $\text{H}_2\text{CO}$ . Para a carga do nitrogênio do  $\text{NH}_3$ , 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