



E317

ESTUDO TEÓRICO DA AFINIDADE POR PRÓTON (AP) EM SISTEMAS $XCH_2CO_2^- + H^+ = XCH_2CO_2H$ (X = F, CL, BR E I) COMO METODOLOGIA DE VALIDAÇÃO DE FUNÇÕES DE BASE

Maurício Chagas da Silva (Bolsista FAPESP) e Prof. Dr. Nelson Henrique Morgon (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

Propriedades eletrônicas de sistemas químicos podem ser estudadas através de várias metodologias teóricas. Um dos passos determinantes para um “bom” cálculo teórico é a escolha do conjunto de base adequado ao sistema a ser estudado, assim, deve-se verificar a qualidade desse conjunto de base. Utilizando-se cálculos teóricos de alto nível correlacionados (MP2 e QCISD(T)) estudou-se a propriedade de AP nos sistemas $XCH_2CO_2^- + H^+ = XCH_2CO_2H$ em fase gasosa (X = F, Cl, Br e I). As bases utilizadas foram geradas através do método da “coordenada geradora” adaptadas a pseudopotenciais. Obteve-se a seguinte ordem de AP para os sistemas estudados: $RF > RCl > RBr > RI$ (R = $CH_2CO_2^-$); a ordem obtida apresentou valores muito próximos aos dados experimentais de AP, estando também de acordo com efeitos eletrônicos que os haletos produzem nos haloácidos. Portanto, as bases geradas apresentaram uma boa qualidade, pois foi possível descrever muito bem a propriedade de AP com erros, em relação a resultados experimentais, na faixa de 3 à 10 kJ mol^{-1} , assim, as bases obtidas podem ser utilizadas em outros estudos envolvendo sistemas similares.

Química Teórica - Afinidade Protônica – Funções de base