



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
INSTITUTO DE QUÍMICA
Laboratório de Cristalografia e Química Computacional
(LCQC)

**ESTUDO MECÂNICO-QUÂNTICO DE DERIVADOS METÓXI E
HIDRÓXI DA MOLÉCULA DE BENZOFURANONA**

ALUNO: MIGUEL ASAPH DE SÁ ALT

ORIENTADOR: EDUARDO DE FARIA FRANCA

UBERLÂNDIA-MG

2017

MIGUEL ASAPH DE SÁ ALT

**ESTUDO MECÂNICO-QUÂNTICO DE DERIVADOS METÓXI E
HIDRÓXI DA MOLÉCULA DE BENZOFURANONA**

Trabalho de conclusão de curso apresentado à
Universidade Federal de Uberlândia, como
requisito parcial à obtenção do título de
Bacharel em Química Industrial.

Área de Concentração: Físico-Química

Orientador: Prof. Dr. Eduardo de Faria Franca

UBERLÂNDIA
2017

MIGUEL ASAPH DE SÁ ALT

**ESTUDO MECÂNICO-QUÂNTICO DE DERIVADOS METÓXI E
HIDRÓXI DA MOLÉCULA DE BENZOFURANONA**

Trabalho de conclusão de curso apresentado à
Universidade Federal de Uberlândia, como
requisito parcial à obtenção do título de
Bacharel em Química Industrial, sob a
orientação do Prof. Dr. Eduardo de Faria
Franca.

Área de Concentração: Físico-Química

Aprovado em ____ de _____ de 2017.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Eduardo de Faria Franca, UFU

Prof. Dr. Carlos Alberto de Oliveira, UFU

Doutorando Roberto Ribeiro Faria

UBERLÂNDIA

2017

AGRADECIMENTOS

Primeiramente à Deus, por ter me guiado em minhas decisões e me dado a sabedoria e discernimento durante todo o período da minha vida.

À minha esposa Bianca pela extrema paciência, pelo imenso amor, pelo carinho, apoio, suporte, por estar sempre ao meu lado quando eu precisei.

À minha mãe Raquel pelo suporte, apoio, incentivo e cuidado durante todos estes anos.

Ao meu pai, Jairo, pelo exemplo de esforço, pelo carinho e por todo o suporte proporcionado.

Ao meu irmão, Leo, pelo exemplo de dedicação, persistência e inteligência.

Aos meus amigos feitos na UFU, pelas partidas de truco, almoços no RU, pelas tardes na Rep dos Mlke, pelas risadas, pelo apoio, suporte e companheirismo durante esses anos. Biel, Poty, Well, Wander, João, Murilo, Gabrus, Iaguinho, Grilo e Titi.

Ao Prof. Dr. Carlos Alberto de Oliveira, por ter sido o meu primeiro orientador, me ensinando que a faculdade é muito mais do que disciplinas e pesquisa, é um local que podemos fazer amizade, até mesmo com professores.

Ao Prof. Dr. Eduardo de Faria Franca pela extrema paciência e ensino didático durante todo esse tempo de pesquisa.

Ao doutorando Roberto Ribeiro por aceitar participar da banca.

À UFU por toda a infraestrutura e apoio durante meu período acadêmico.

RESUMO

A equação de Schrodinger é a base dos cálculos, utilizando a função de onda, que carrega as informações da molécula. Os cálculos computacionais na área da química podem ser divididos em duas partes, semi-empírico e quântico.

A eficiência do cálculo está representada na energia total do sistema, que representa a estabilidade do composto. Os métodos aplicados foram: PM6, PM7, Ab-Initio, DFT, DFT-631G e MP2. Outras variáveis analisadas foram o GAP dos orbitais de fronteira HOMO-LUMO, o tempo gasto nos cálculos e a distância estrutural com a molécula de origem cristalográfica. Para otimizar o cálculo e obter melhor resultado para a realidade dos laboratórios de química quântica, é necessário escolher o melhor método com a melhor função de base.

Conclui-se que o método DFT-631G foi o melhor, pois energeticamente apresentou resultados similares aos outros métodos quânticos, mesmo com uma função de base mais simples, e em relação ao tempo obteve resultados superiores aos outros modelos quânticos.

Palavras chave: química quântica, PM6, PM7, Ab-Initio, DFT, MP2

ABSTRACT

The Schrodinger equation is the basis of the calculation, using the wave function, which carries the information of the molecule. Computational calculation in the field of chemistry can be divided in two parts, semi-empirical and quantum.

The efficiency of the calculations is represented in the total energy of the system, which represents the stability of the compound. The methods applied were: PM6, PM7, Ab-Initio, DFT, DFT-631G and MP2. Other variables analyzed were the GAP of HOMO-LUMO frontier orbitals, the time spent in calculations and the structural distance with the molecule of crystallographic origin. To optimize the calculation and obtain better results for the reality of quantum chemistry laboratories, it is necessary to choose the best method with the best basic function.

It is concluded that the DFT-631G method was the best, because it presented similar results to other quantum methods, even with a simple base function, and in relation to the time it obtained results superior to the other quantum models.

Keywords: quantum chemistry, PM6, PM7, Ab-Initio, DFT, MP2

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	9
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	12
2.1	EQUAÇÃO DE SCHRODINGER	12
2.2	BORN-OPPENHEIMER	13
2.3	HARTREE FOCK	14
2.4	MOLLER-PLESSET	15
2.5	SEMI-EMPÍRICO	17
2.6	AB INITIO	18
2.7	CONJUNTOS DE BASE	18
2.8	TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE (DFT)	19
2.9	ORBITAIS DE FRONTEIRA	20
3	METODOLOGIA	21
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	22
5	CONCLUSÃO	32
6	REFERÊNCIAS	33
7	ANEXOS	37

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 - Molécula 1 - 6-metoxiisobenzofuran-1(3H)-ona	9
Figura 2 - Molécula 2 - 5-metoxi-2-benzofuran-1(3H)-ona	10
Figura 3 - Molécula 3 - 6-hidroxi-isobenzofuran-1(3H)-ona	11
Figura 4 - Molécula 4 - 5-hidroxi-isobenzofuran-1(3H)-ona	11
Figura 5 - Tempo de cálculo da molécula 1	22
Figura 6 - Tempo de cálculo da molécula 2	23
Figura 7 - Tempo de cálculo da molécula 3	23
Figura 8 - Tempo de cálculo da molécula 4	24
Figura 9 - GAP da Molécula 1	25
Figura 10 - GAP da Molécula 2	25
Figura 11 - GAP da Molécula 3	26
Figura 12 - GAP da Molécula 4	26
Figura 13 - Energia Total do Sistema - Molécula 1	27
Figura 14 - Energia Total do Sistema - Molécula 2	27
Figura 15 - Energia Total do Sistema - Molécula 3	28
Figura 16 - Energia Total do Sistema - Molécula 4	28
Figura 17 - Sobreposição da Molécula 1	29
Figura 18 - Sobreposição da Molécula 2	29
Figura 19 - Sobreposição da Molécula 3	30
Figura 20 - Sobreposição da Molécula 4	30
ANEXO - Figura 21 - Composto 1 - HOMO	37
ANEXO - Figura 22 - Composto 1 - LUMO	37
ANEXO - Figura 23 - Composto 1 - Potencial Eletrostático	38
ANEXO - Figura 24 - Composto 2 - HOMO	38
ANEXO - Figura 25 - Composto 2 - LUMO	39
ANEXO - Figura 26 - Composto 2 - Potencial eletrostático	39
ANEXO - Figura 27 - Composto 3 - HOMO	40
ANEXO - Figura 28 - Composto 3 - LUMO	40
ANEXO - Figura 29 - Composto 3 - Potencial eletrostático	41
ANEXO - Figura 30 - Composto 4 - HOMO	41
ANEXO - Figura 31 - Composto 4 - LUMO	42
ANEXO - Figura 32 - Composto 4 - Potencial eletrostático	42

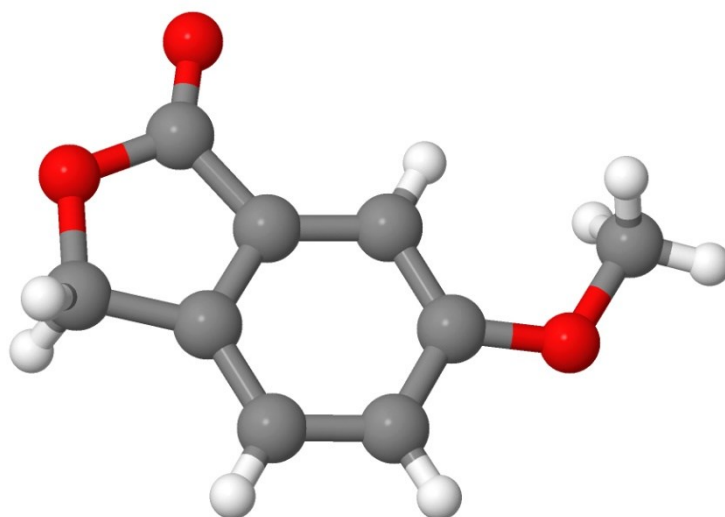
1 INTRODUÇÃO

A química quântica vem sendo cada vez mais estudada nas universidades, e juntamente com a química vem sua aplicação teórica e seus cálculos computacionais, que demandam de hardwares de alta eficiência, muitas vezes caros, para efetuarem os cálculos. Para que haja otimização do tempo, não demandando de um supercomputador, é necessário analisar os diversos cálculos presentes hoje, e utilizar aquele que mais se aplica à necessidade do profissional.

Foram escolhidas quatro moléculas, cujas estruturas cristalinas foram determinadas pelo Laboratório de Cristalografia e Química Computacional (LCQC) da Universidade Federal de Uberlândia.

A molécula 6-metoxiisobenzofuran-1(3H)-ona está presente em diversos compostos que apresenta atividades biológicas que vão desde bactericidas (BRADY et al., 2000), antioxidante (ZHU et al., 2012), anticonvulsivante (CARDOZO et al., 2005), e anti-HIV (YOGANATHAN et al., 2003) para inibição de transporte de elétrons fotossintéticos (DEMUNER et al., 2006). Seu empacotamento cristalino é estabilizado por interações intermoleculares de ligações de hidrogênio e interações pi-pi.

Figura 1 - Molécula 1 - 6-metoxiisobenzofuran-1(3H)-ona



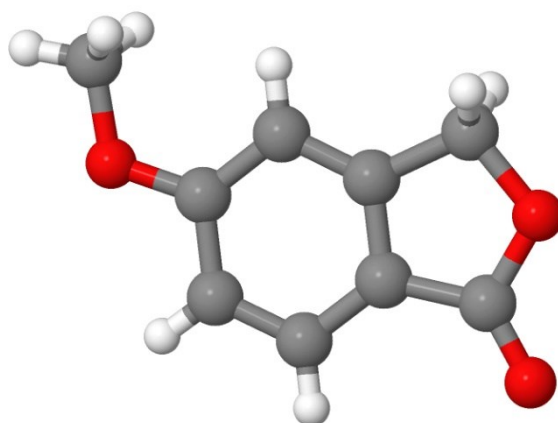
Jmol

Fonte: Própria (2017) criado no programa Jmol

A molécula 5-metoxi-2-benzofuran-1(3H)-ona faz parte de uma classe de compostos heterocíclicos que ocorrem em vários produtos naturais e foram investigados por várias propriedades biológicas, tais como antiplaquetárias (MA et al., 2012) e atividades antioxidantes (HUANG et al., 2012), inibição da citotoxicidade induzida pelo glutamato em células PC12

(ZHAO et al., 2012) e fitotoxicidade (ARNONE et al., 2002). No cristal, as moléculas são ligadas através de ligações de hidrogênio ao longo do plano, formando uma rede bidimensional.

Figura 2 - Molécula 2 - 5-metoxi-2-benzofuran-1(3H)-ona

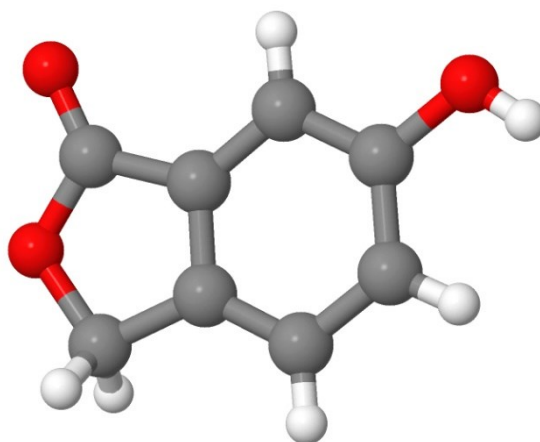


Jmol

Fonte: Própria (2017) criado no programa Jmol

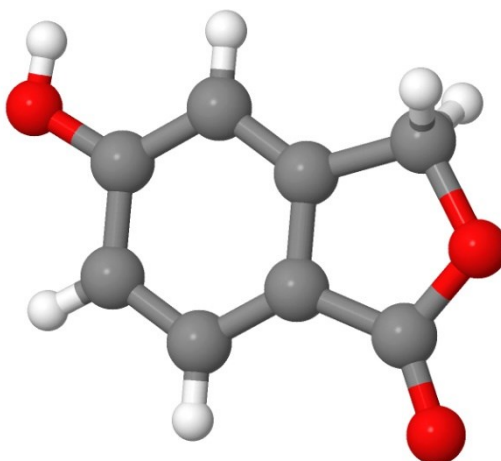
As moléculas de isobenzofuran-1(3H)-onas hidroxiladas (ftalidas) atraíram a atenção de vários grupos de pesquisa devido à sua ampla gama de propriedades medicinais que incluem antiproliferativa (LOGRADO et al, 2010), anticonvulsivante (CARDOZO et al, 2005), antioxidante (HUANG et al, 2012), antiplaquetária (MA et al, 2012) e anti-HIV (YOGONATHAN et al, 2003), e a capacidade de inibir a síntese de ATP no cloroplasto (DEMUNER et al, 2006).

Figura 3 - Molécula 3 – 6-hidroxi-isobenzofuran-1(3H)-ona



Fonte: Própria (2017) criado no programa Jmol

Figura 4 - Molécula 4 – 5-hidroxi-isobenzofuran-1(3H)-ona



Fonte: Própria (2017) criado no programa Jmol

Jmol

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

A química quântica é a aplicação da mecânica quântica às moléculas e átomos. Físico-químicos utilizam a mecânica quântica para calcular propriedades termodinâmicas (entropia, capacidade calorífica); para interpretar espectros de moléculas, obtendo assim algumas propriedades moleculares (comprimento de ligação e ângulos de ligação, momentos dipolo, diferença de energia entre isômeros conformacionais); para calcular propriedades moleculares, teoricamente; para calcular propriedades dos estados de transição das reações químicas; para compreender forças intermoleculares, entre outros.

2.1 EQUAÇÃO DE SCHRODINGER

Pensando que existe uma partícula de massa m , que está sendo forçada a se mover pelo eixo x , sujeita a uma força $F(x,t)$. A mecânica clássica consegue determinar a posição da partícula em qualquer momento: $x(t)$. Pode-se descobrir a velocidade ($v=dx/dt$), o momento ($p=mv$), a energia cinética ($T=(1/2)mv^2$) ou qualquer outra variável dinâmica de interesse, mas como determina-se $x(t)$? Aplicando a segunda lei de Newton: $F = ma$ (para sistemas conservadores). Força pode ser representada em função da energia potencial, $F=-dV/dx$, lendo pela lei de Newton: $m d^2x/d^2t = -dV/dx$. Com as condições iniciais apropriadas (posição e velocidade em $t=0$) m determina $x(t)$. A mecânica quântica consegue ver esse problema de uma maneira distinta. O que procura-se é a função de onda $\Psi(x,t)$ da partícula, e consegue-se quando a equação de Schrodinger é solucionada.

A equação de Schrodinger funciona analogamente à segunda lei de Newton: com condições iniciais adequadas, a equação determina $\Psi(x,t)$ para todo tempo futuro. Mas o que seria essa “função de onda”, e por que a obteríamos? Afinal, a partícula é localizada em um ponto, enquanto a função de onda está espalhada no espaço. Como o objeto pode ser dito para descrever o estado de uma partícula? A resposta está baseada na interpretação estatística de Born, da função de onda, que diz que $|\Psi(x,t)|^2$ fornece a probabilidade de encontrar a partícula no ponto x , no tempo t . (GRIFFITHS, 1995)

A referência de toda descrição quântica de um sistema está aplicada à equação de Schrodinger, independente do tempo, podendo ser escrita como:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (1)$$

A equação de Schrodinger é de autovalores: quando um operador atua sobre a função de onda, a resultante é a mesma função, mas agora multiplicada por uma constante. A função de onda Ψ é a autofunção do operador hamiltoniano (H) correspondente ao autovalor E (energia do sistema). A função de onda carrega consigo as informações da partícula em estudo, a descrição exata e completa do sistema, podendo calcular, assim, as propriedades da mesma, já que possui as informações necessárias para a predição das propriedades moleculares e atômicas (BUNGE, 1977; McWEENY, 1973).

Quando aplica-se a equação de Schrodinger para um sistema com átomos e moléculas, a aparente simplicidade da equação desaparece. O termo H (Hamiltoniano), corresponde a um operador, que quando aplicado à função de onda permite obter informações sobre o sistema, e é dado por:

$$\hat{H} = T + V_{e-e} + V_{e+n} + V_{n-n} \quad (2)$$

Onde T representa a energia cinética dos elétrons, V_{e-e} é a energia potencial dada à interação elétron-elétron, V_{e+n} representa a energia potencial da interação elétron-núcleo e V_{n-n} representa a interação núcleo-núcleo (MOLFETTA, 2007)

2.2 BORN-OPPENHEIMER

Para a equação de Schrodinger não há solução exata quando vários corpos estão envolvidos. Por este fato, algumas aproximações são necessárias. A primeira deles é a aproximação de Born-Oppenheimer, que trata de maneira separada o movimento nuclear e eletrônico. A aproximação está baseada no fato da massa do elétron ser muito menor que a massa do núcleo, e por isso o núcleo é menos sensível à perturbação externa, sendo tratado como momentaneamente fixo (RINKE, 2014, p.3).

Logo, considera-se que os elétrons se movem com o núcleo fixo, podendo assim retirar o termo da energia cinética do núcleo da equação. Além disso, o termo energia potencial da interação núcleo-núcleo é uma constante. Logo, o hamiltoniano do sistema é dado por:

$$\hat{H} = \hat{H}_{ele} + V_{n-n} \quad (3)$$

Onde

$$\hat{H}_{ele} = T_e + V_{e-e} + V_{e+n} \quad (4)$$

Baseado nessas informações pode-se reescrever a equação 1 de tal maneira:

$$\mathbf{H}_{\text{ele}} \Psi_{\text{ele}} = \mathbf{E}_{\text{ele}} \Psi_{\text{ele}} \quad (5)$$

Apesar da aproximação de Born-Oppenheimer introduzir algumas simplificações no cálculo do hamiltoniano, ainda assim, não é possível calcular com exatidão um sistema polieletrônico. Por isto é necessário introduzir outra aproximação, de Hartree Fock, aproximação de campo central.

A aproximação tem como fundamento definir um potencial de campo médio. Assim o potencial percebido pelo *i-ésimo* elétron resulta da distribuição média das cargas dos outros N-1 elétrons, combinada a carga nuclear. Portanto, o termo da repulsão para *i* não é mais um somatório sobre os demais elétrons individualmente, mas um único termo (SANTOS, 1992).

2.3 HARTREE FOCK

A equação de Schrodinger, mesmo depois da aproximação de Born-Oppenheimer, continua intratável devido à presença do potencial V_{e-e} , sendo assim necessário uma outra aproximação. Hartree, em 1927, propôs que a função de onda eletrônica poderia ser escrita como produto de funções de onda monoelétrica e ortogonais, e assim, cada elétron iria interagir com o potencial médio formado pelos outros elétrons e núcleos do sistema (PARR, 1963).

Assume-se que cada elétron se sujeita a um potencial gerado por outros elétrons. Sendo assim, o hamiltoniano que opera sobre um sistema de N elétrons é substituído pela soma de N hamiltonianos efetivos de um elétron cada (WEISS, 2013, p62)

Utiliza-se o determinante de Slater para construir funções de onda anti-simétricas, o operador Fock ($\hat{F}$) e o princípio variacional. Assim, a energia orbital do sistema (ϵ_i) é minimizada, tendo como objetivo calcular os coeficientes de expansão (c_{ik}) e, finalmente, obtendo as propriedades do sistema desejadas, como por exemplo a energia total (ATKINS et al, 2005).

$$\hat{F} \sum_k^n c_{ik} \chi_k = \epsilon_i \sum_k^n c_{ik} \chi_k \quad (6)$$

Na equação χ_i são as *n* funções monoelétrônicas usadas.

O método Hartree-Fock é resultado da junção da aproximação da função de onda pelo determinante de Slater:

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{bmatrix} \Psi_{11} & \dots & \Psi_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Psi_{n1} & \dots & \Psi_{nn} \end{bmatrix} \quad (7)$$

Sendo o termo $\frac{1}{\sqrt{n!}}$ o fator de normalização da função de onda, conhecido como determinante de Slater. O determinante de Slater tem como função reduzir a função de onda do espaço $3N$ dimensional a um espaço de N funções no espaço tri-dimensional, sendo este tratável computacionalmente, e ainda garantindo a anti-simetria da função (GOMES, 2001).

O método Hartree-Fock prevê um limite superior para a energia de átomos que estejam em seu estado fundamental (FRIESECKE 2003).

A aplicação do método parte do princípio que os elétrons interagem entre si ignorando a correlação eletrônica, podendo ter consequências nas interpretações das funções de onda (FROOSE-FICHER, 1977).

As soluções sem aproximações levam ao limite do método, sendo possível calcular o erro proveniente da aplicação de um determinante de Slater com um número finito de termos, sendo chamado, o erro, de Energia de Correlação. (ATKINS; FRIEDMAN, 2005)

A energia de correlação corresponde a pequena parte da energia total não calculada. Pode-se então definir a energia de correlação como sendo a diferença entre a energia exata e a melhor energia capaz de ser obtida com o método Hartree Fock, usando uma base completa que contém um número infinito de funções de base (SZABO et al, 1982)

2.4 MOLLER-PLESSET

O método Hartree-Fock não inclui em seu cálculo a correlação eletrônica. A Teoria de Perturbação de Muitos Corpos (MBPT) é um método que é dirigido para o cálculo da energia adotando a correlação eletrônica. O método se baseia em um operador hamiltoniano, sendo um de referência ($\hat{H}_0$) e um de perturbação ($\hat{H}'$) (ARRUDA, 2009).

Na década de 30, Moller e Plesset apresentaram um tratamento perturbativo de átomos e moléculas, em que a função de onda não perturbada é a de Hartree-Fock. Essa maneira de apresentar a perturbação ficou conhecida como a teórica de perturbação de Moller-Plesset.

O tratamento da teoria de perturbação considera a equação de Schrodinger para um sistema multi-eletrônico, como mostra a equação a seguir:

$$\hat{H}|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle \quad (8)$$

A autofunção de um operador hamiltoniano ($\hat{H}$) com auto valores (φ_i) é dada pela equação:

$$\hat{H}_0|\Psi_{\varphi_i}\rangle = E_i|\Psi_i\rangle \quad (9)$$

A teoria da perturbação consiste em expandir, segundo a potência de perturbação λ .

$$\epsilon_i = E_j + \lambda E_1 + \lambda^2 E_2 + \lambda^3 E_3 + \dots \quad (10)$$

$$|\varphi_i\rangle = |\Psi_j\rangle + \lambda|\Psi_1\rangle + \lambda^2|\Psi_2\rangle + \lambda^3|\Psi_3\rangle + \dots \quad (11)$$

Onde E_1 é a correção de primeira ordem para a energia ($E = E_j + E_1$), E_2 é a correção de segunda ordem e, assim por diante. A energia E_1 corresponde a energia de Hartree-Fock e cada ordem acrescentada visa melhorar a correção da energia.

Normalizando φ_1 , ($\langle\varphi_1|\Psi_j\rangle=1$), separando os termos λ^n e substituindo na equação 11, obtemos expressões para n-ésimas energias, de acordo com o conjunto de expressões 12, 13 e 14 abaixo:

$$E_j = \langle\Psi_j|\hat{H}_0|\Psi_j\rangle \quad (12)$$

$$E_1 = \langle\Psi_j|\hat{V}_0|\Psi_j\rangle \quad (13)$$

$$E_3 = \langle\Psi_j|\hat{V}_0|\Psi_j\rangle \quad (14)$$

A expansão da função de onda Ψ_1 em termos de auto-vetores de $\hat{H}_0(\Psi_0)$ e a energia de perturbação de segunda ordem, dependem apenas dos auto-vetores conhecidos de $\hat{H}_0$, logo:

$$E_2 = \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle\Psi_j|\hat{V}|\Psi_n\rangle|^2}{E_j - E_n} \quad (15)$$

Considerando-se a energia molecular como $E_0 + E_1 + E_2 = E_{HF} + E_2$, obtém-se o cálculo denominado MP2, a representação da inclusão de correção de energia de segunda ordem, pela excitação dupla de elétrons é identificada pelo número 2. As correções de energia de ordens maiores ($n > 2$) já foram desenvolvidas, para $n=3$ e $n=4$, terceira e quarta ordem respectivamente (SZABO et al, 1989).

Na prática o aumento da ordem, não reflete obrigatoriamente uma melhora significativa na correção da energia, desta forma não compensando a demanda computacional (CASTRO et al, 2007).

2.5 SEMI-EMPÍRICO

Métodos semi-empíricos utilizam um hamiltoniano mais simples que o molecular correto, e utilizam parâmetros cujos valores são adequados aos dados experimentais ou aos resultados dos cálculos ab initio (LEVINE, 2000).

Os métodos semi-empíricos combinam física teórica com experimental (LASHUK, 2005). Semelhante ao método Ab Initio, começa com a resolução da equação de Schrodinger e então introduz algumas hipóteses, visando diminuir o tempo dos cálculos (BARREIRO; RODRIGUES, 1997).

Os métodos semi-empíricos não conseguem resolver a matriz de Fock (LEWARS, 2011), utilizando como base dados espectroscópicos ou propriedades físicas, como energia de ionização, ou então utilizando uma série de regras para definir certas integrais igual a zero (ATKINS et al., 2009). Os cálculos semi-empíricos demandam computacionalmente muito menos que os Ab Initio, pelo fato da redução de integrais que devem ser calculadas. (ATKINS; FRIEDMAN, 2005).

Vários métodos semi-empíricos se baseiam na aproximação NDDO - Neglect of Diatomic Differential Overlap. Este é restrito às moléculas de camada fechada e aos elétrons de valência nelas e adota a aproximação do caroço, assumindo a movimentação dos elétrons em volta do núcleo fixo (DEWAR; THIEL, 1977b).

O método MNDO (Modified neglect of diatomic overlap), trabalha com as integrais de repulsão de dois elétrons não avaliadas por fórmulas analíticas, mas por um modelo semi-empírico, levando em consideração efeitos de correlação (DEWAR; THIEL, 1977b).

O método AM1 (Austin Model 1) muda a função de repulsão do núcleo do método MNDO, por este superestimar a repulsão dos átomos em interações de van der Waals, ao inserir funções gaussianas atrativas e/ou repulsivas (DEWAR et al., 1985)

Visando otimizar os parâmetros do método MNDO, Stewart (1989) desenvolveu uma metodologia, denominada PM3 (Parametric Method 3), com base em funções de referência que representam fenômenos observados experimentalmente.

O método PM6 (STEWART, 2013), inclui orbitais d para os elementos representativos, faz algumas alterações no termo de repulsão núcleo-núcleo. O método PM7 (STEWART 2013), visando aprimorar a descrição de interações não-covalentes, promove modificações no método, baseado nas referências experimentais e *ab initio* de alto nível, obtendo assim, um melhor resultado.

2.6 AB INITIO

O termo *ab initio*, no latim, significa “desde o princípio”. O método resolve a equação de Schrodinger eletrônica, para uma molécula ou um átomo, a partir de uma certa função de onda, usando como entrada constantes fundamentais e algumas informações sobre os núcleos (número atômico e coordenadas) (ATKINS; FRIEDMAN, 2005, .287)

A eficiência do método é baseada no tipo de função de onda adotado (função ou conjunto de base). Para vários métodos *ab initio*, a aproximação de Hartree-Fock serviu como base. Esses cálculos *ab initio* podem produzir alguns resultados bastante satisfatórios para moléculas pequenas, sendo inviáveis para grandes sistemas moleculares (LASCHUK, 2005, p. 2).

Um cálculo *ab initio* usa o hamiltoniano correto e não dados experimentais. Um cálculo *ab initio* usa a aproximação de tomar como um produto antissimétrico dos orbitais de um elétron e usa um finito (portanto, incompleto) conjunto de bases. (LEVINE, 2000)

2.7 CONJUNTOS DE BASE

A eficiência do cálculo da estrutura eletrônica se baseia nas funções de base escolhidas, que descrevem os orbitais moleculares. A energia obtida mínima, energia limitante, é chamada de Limite de Hartree-Fock, por mais que seja a menor energia encontrada, não corresponde ao valor exato de energia no estado fundamental da molécula, já que o método não inclui os efeitos de correlação. (ATKINS; FRIEDMAN, 2005, p. 296).

Para que não haja um esforço computacional elevado, deve-se escolher bem a função de base, pois o número de integrais a serem resolvidas aumenta com a quantidade de funções aplicadas. Os resultados obtidos serão melhores, mas o tempo gasto vai ser maior. (OLIVEIRA, 2008, p. 40)

Uma função de base é a resultante da combinação linear de funções linearmente independentes, utilizada para descrever orbitais atômicos ou moleculares.

Na década de 50, LOWDIN, 1953 propôs o uso das funções gaussianas:

$$\chi_i = N x_A^k y_A^l z_A^m e^{-\alpha_i r^2} \quad (16)$$

As funções estão centradas no núcleo A, sendo composta por três coordenadas cartesianas. A operação $k + l + m$, fornece o número quântico azimutal, referente à simetria do orbital (s, p, d, f). N é o fator de normalização. Uma vez que o produto de duas gaussianas é outra gaussiana, essas funções podem ser usadas para resolver o problema de várias integrais de vários centros (MARTINS, 2013).

Esses conjuntos, ou funções de base, não leva em consideração distorções da nuvem eletrônica. Por isso é necessário a adição de funções extras, como as funções de polarização e as funções difusas.

Funções de polarização auxiliam na descrição das distorções das nuvens eletrônicas em moléculas ou aglomerados moleculares, descrevendo a correlação angular de uma função tipo s, tipo p (d,f, etc) (KLOPPER; KUTZELNIGGE, 1986).

Funções difusas são gaussianas acrescentadas na base original, as mesmas da região de valência do átomo, mas com valores de expoente menores. Tem como finalidade o cálculo de propriedades de ânions, moléculas com pares de elétrons não compartilhados, ligação de hidrogênio, estados excitados, entre outros (NETO, 2015).

2.8 TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE (DFT)

A teoria tem como finalidade obter propriedades do estado fundamental das moléculas sem precisar da função de onda multieletrônica. Para que possa estabelecer a dependência da densidade com a energia, dois teoremas foram estabelecidos por Hohenberg-Kohn. O primeiro diz que existe uma relação entre todas as energias, que inclui a energia total e a densidade, ou seja, a energia é um *funcional* da densidade. O segundo estabelece que, como aconteceu com a teoria dos orbitais moleculares com a função de onda, o funcional da densidade também obedece ao formalismo do princípio variacional, ou seja, para a densidade eletrônica obtida, a energia dada é sempre maior ou igual à energia obtida usando o funcional de densidade (SZABO, 1989).

A densidade, uma observável 3D, é usada como ferramenta para a descrição das interações entre os elétrons, determinando assim as informações sobre o sistema. Um sistema que a função de onda teria dificuldade em calcular as interações seriam facilmente resolvidas pelo DFT (COHEN et al., 2012) Por este fato, e pela não demanda alta de um bom hardware, o

método teve uma boa difusão, tornando assim, um dos métodos mais populares e mais utilizados. (KADUK et al., 2012)

Hohenberg e Kohn, na década de 60 propuseram que a energia no estado fundamental juntamente com todas as outras energias e propriedades podem ser determinadas pela densidade eletrônica, não demonstrando a forma da dependência da energia na densidade, mas sim, um funcional. (ATKINS; FRIEDMAN, 2005).

Kohn e Sham, posteriormente, aprimoraram o método e aplicaram uma série de equações de densidade alto-consistentes, para um conjunto de orbitais, definindo com precisão o sistema real (BURKE, 2012). Nas equações o termo da energia da correlação e troca aparece, também sendo um funcional da densidade levando em consideração as interações elétron-elétron (ATKINS; FRIEDMAN, 2005).

O método DFT tem suas limitações, e o erro mais perceptível se baseia na natureza aproximada da energia de troca e de correlação. Mas ainda assim, esquemas têm sido desenvolvidos buscando formas aproximadas do funcional para esta energia (ATKINS; FRIEDMAN, 2005).

O funcional B3LYP (utilizado nos cálculos), é atualmente um dos mais utilizados de acordo com (MUSSO et al., 2011; ICHINO et al., 2012), sendo um funcional híbrido, contendo em sua formulação funcionais de troca e correlação, incluindo contribuições do método Hartree-Fock. Foi desenvolvido por Becke, Lee, Yang e Parr (PEREIRA, 2008).

2.9 ORBITAIS DE FRONTEIRA

Um grupo de japoneses, liderados por Kenichi Fukui, que pesquisava sobre a reatividade dos compostos aromáticos, começou a estudar os termos HOMO e LUMO (HOMO: Orbital Molecular Ocupado de maior energia; LUMO: Orbital Molecular Desocupado de menor energia), visando analisar a reatividade dos compostos (FUKUI et al, 1952).

A diferença das energias dos orbitais HOMO-LUMO é chamada de GAP, que indica a estabilidade molecular. O GAP é calculado através da diferença entre HOMO-LUMO, indicando a reatividade do composto. Quando o valor do GAP é baixo, as moléculas são muito reativas, enquanto que moléculas com altos valores de GAP são estáveis, apresentando baixa reatividade. (ZHANG, 2007).

3 METODOLOGIA

Os cálculos foram efetuados com os programas ORCA para os cálculos AB-INITIO, MP2, DFT e DFT-631G (para cálculos quânticos) e MOPAC para os cálculos utilizando PM6 e PM7 (para cálculos com método semi-empírico).

Para os métodos semi-empíricos os próprios cálculos forneciam os valores de HOMO e LUMO, o valor da energia total do sistema, o tempo de cálculo. Para os cálculos quânticos utilizou-se o programa Gabedit, para analisar a energia total do sistema, o tempo de cálculo e os valores de HOMO e LUMO.

No trabalho, utilizamos as funções de base 6-311++G(d,p) e 6-31G*. Para a primeira função de base empregamos o cálculo com seis gaussianas no orbital de caroço, triple zeta com três gaussianas no primeiro zeta, uma gaussianas no segundo e terceiro, para os orbitais de valência. Adicionamos funções difusas para todos os átomos da molécula, inclusive para o átomo de hidrogênio, e incluímos funções de polarização, orbitais *d* para os heteroátomos e orbitais *p* para os átomos de hidrogênio.

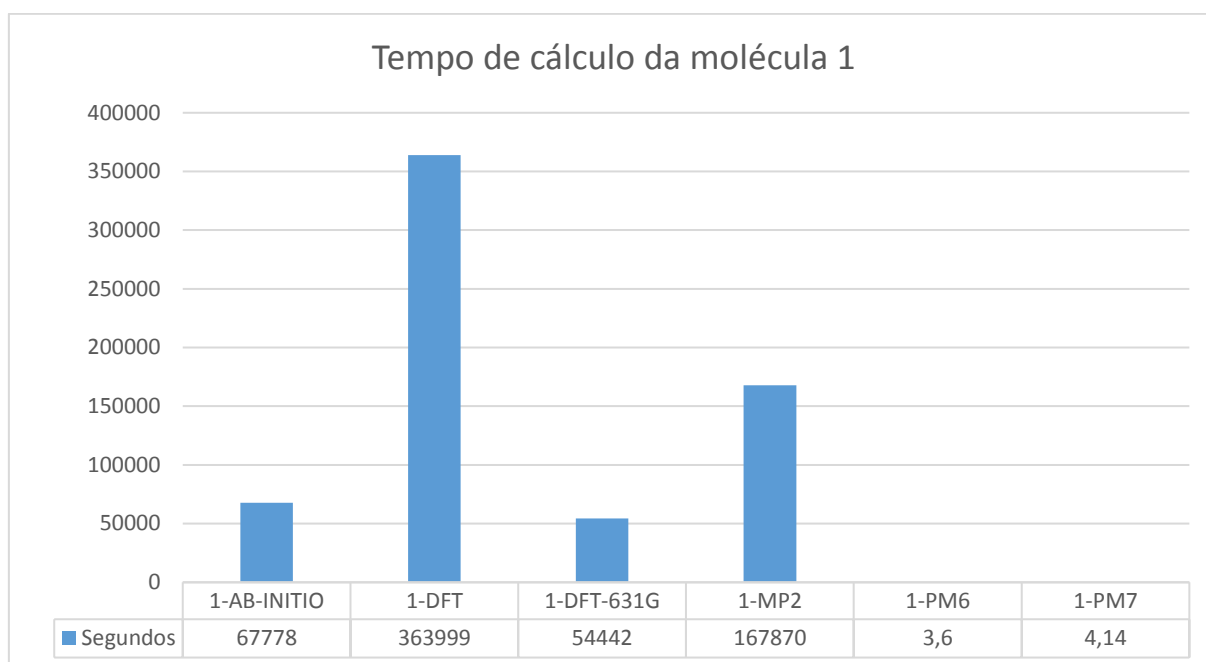
Analisando as variáveis, foram construídos gráficos no programa Excel, fornecendo os valores do tempo em segundos e da energia total do sistema e GAP em eV. Os gráficos também comparam diretamente todos os métodos, visando buscar o melhor método.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

As variáveis analisadas foram o tempo em segundos, a energia total do sistema e o GAP de energia em eV. Foram comparados os métodos DFT, AB-INITIO, DFT-631G, MP2, PM6 e PM7 para cada molécula.

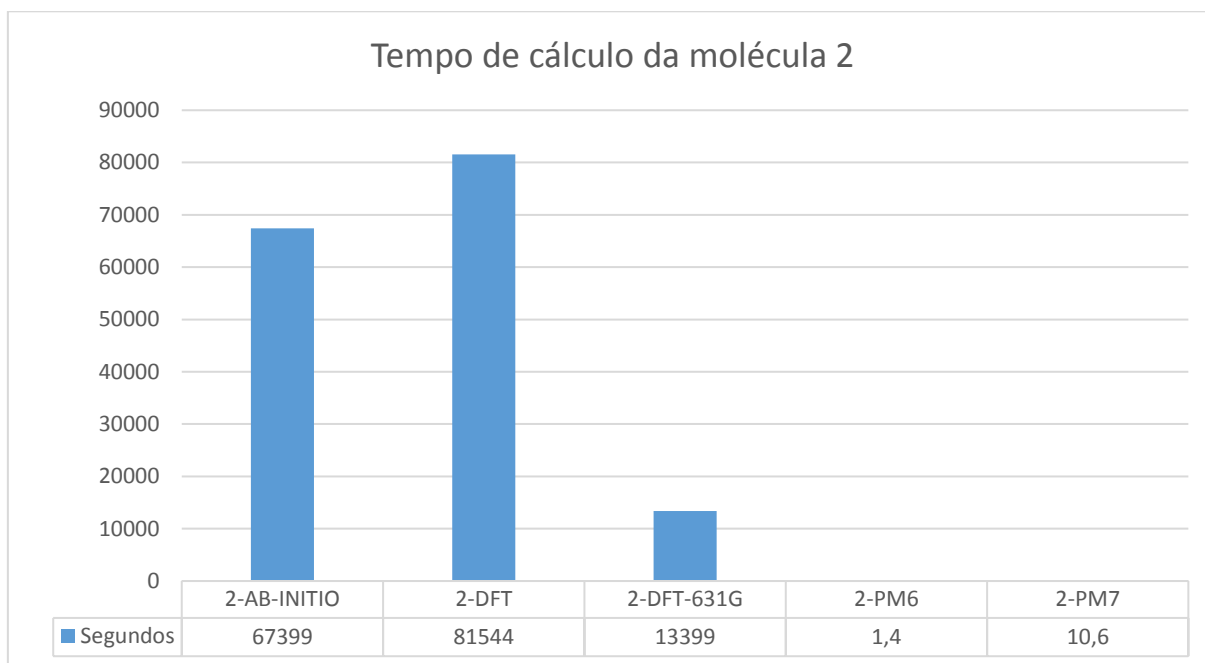
Analisando o tempo gasto no cálculo da molécula 1, de acordo com o gráfico 1:

Figura 5 - Tempo de cálculo da molécula 1



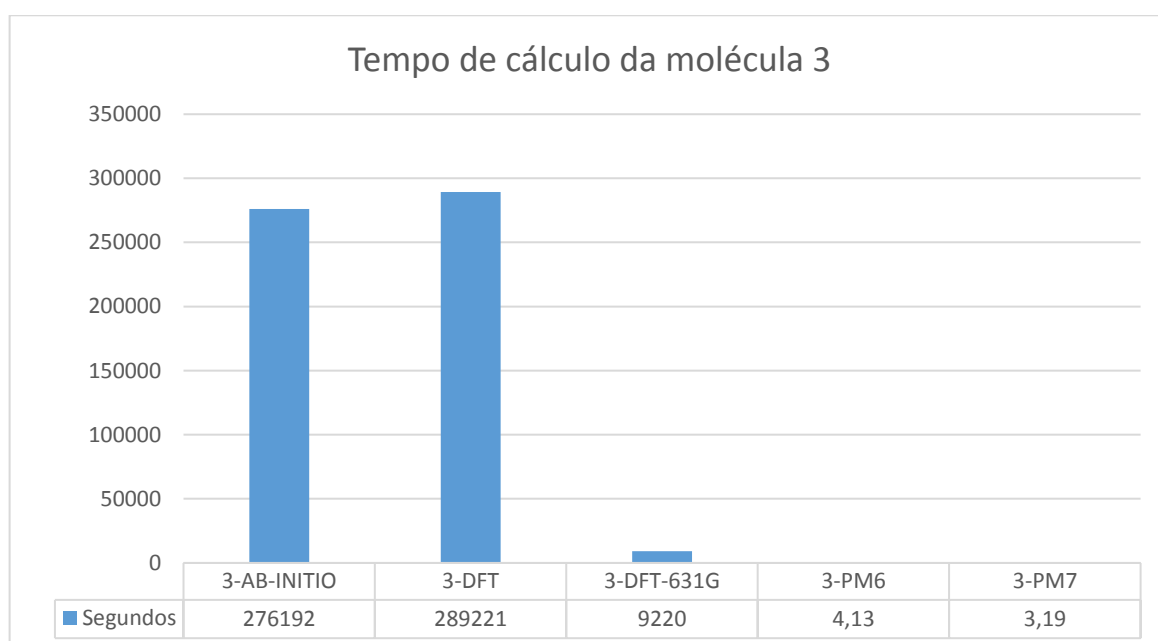
Fonte: Própria (2017)

Nota-se que o tempo gasto para os métodos semi-empíricos é desprezível comparado aos quânticos. Analisando apenas os métodos quânticos, o método DFT-631G obteve o melhor resultado, o que já era esperado pela sua função de base ser mais simples, demandando assim, menos tempo. Observa-se também o longo tempo do cálculo DFT, que se deve ao fato de usar uma função de base maior, uma triplo zeta (6-311++G(d,p)).

Figura 6 - Tempo de cálculo da molécula 2

Fonte: Própria (2017)

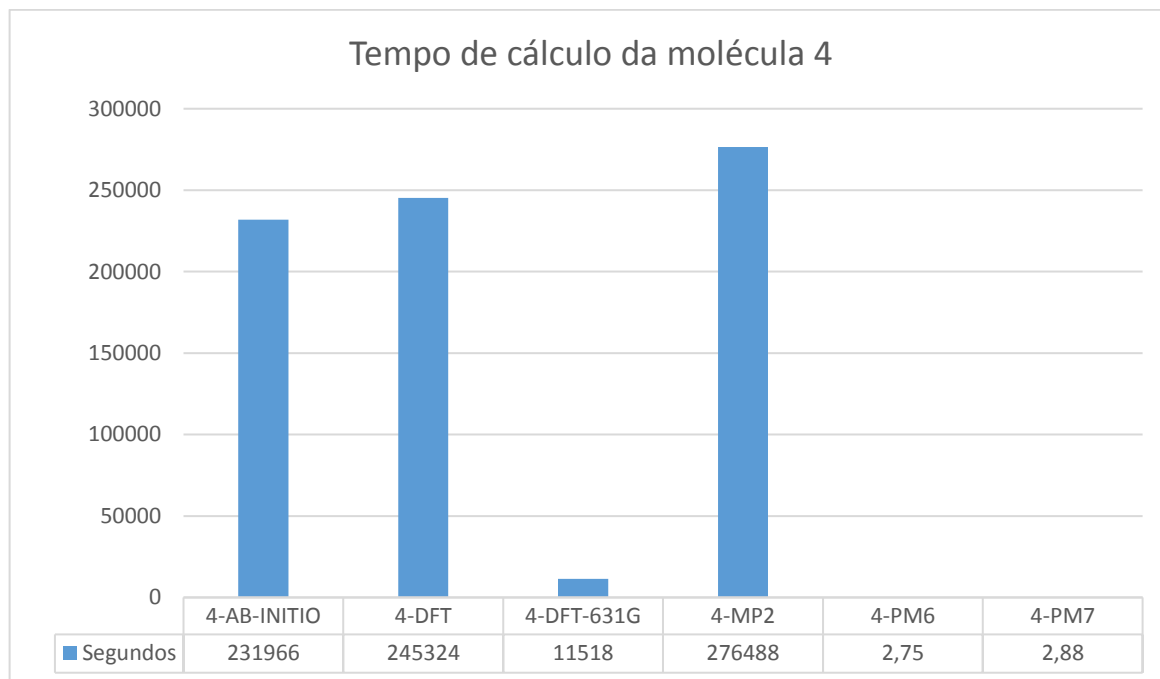
De acordo com o gráfico 2, nota-se que segue o mesmo padrão do gráfico 1, com acréscimo do tempo no cálculo ab-initio.

Figura 7 - Tempo de cálculo da molécula 3

Fonte: Própria (2017)

Analisando o gráfico 3, o que podemos perceber é que o cálculo para DFT-631G diminuiu ainda mais o tempo em comparação com os outros métodos quânticos, obtendo assim um ótimo resultado, considerando ele sendo um método quântico.

Figura 8 - Tempo de cálculo da molécula 4

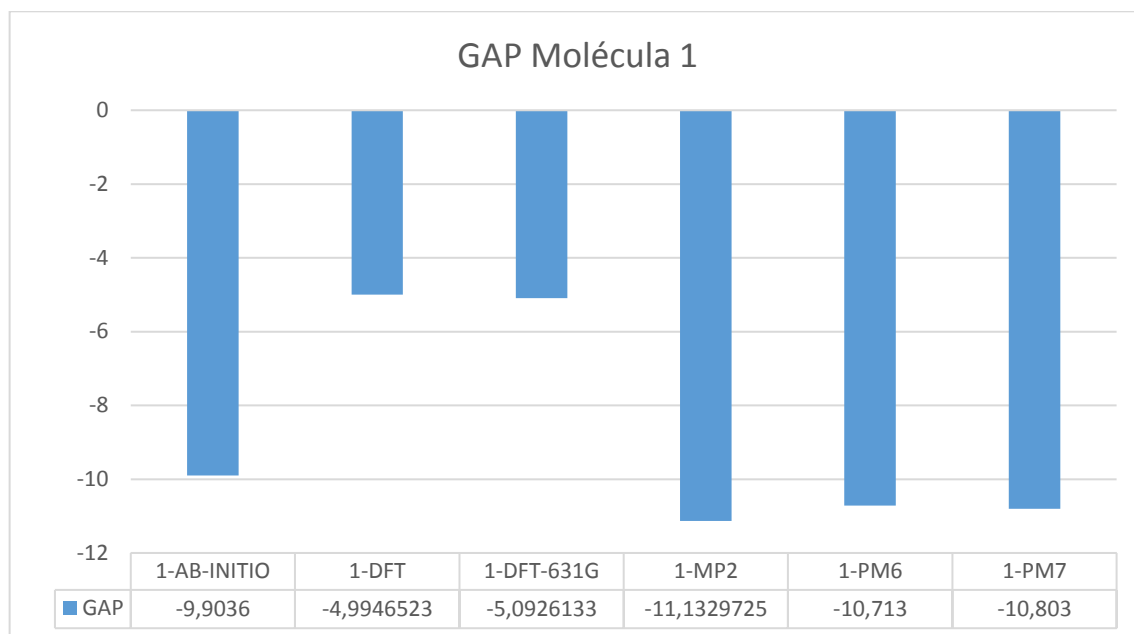


Fonte: Própria (2017)

Observa-se no gráfico 4 que o tempo dos cálculos ainda segue o mesmo padrão, mas houve um aumento no tempo de cálculo para o método MP2, o que era esperado devido ao fato da teoria de perturbação demandar maiores cálculos, e nota-se ainda o tempo baixo para o método DFT-631G, se mostrando um ótimo cálculo quântico analisando o tempo.

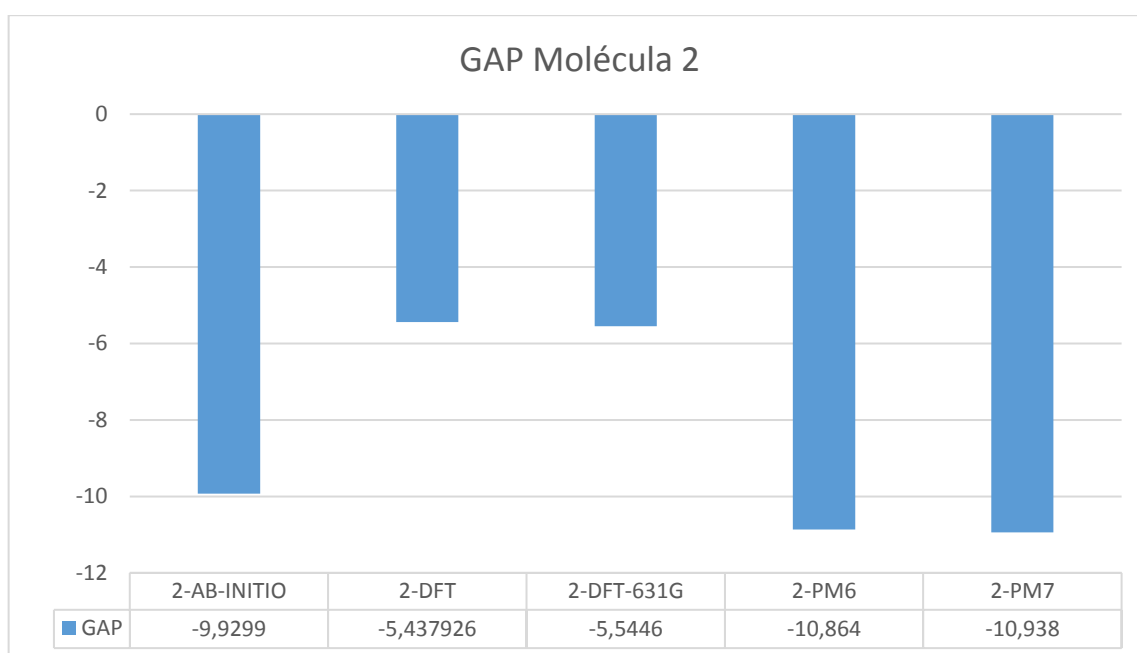
Analisando de acordo com o GAP, dado em elétron volt para as moléculas 1, 2, 3 e 4:

Figura 9 - GAP da Molécula 1



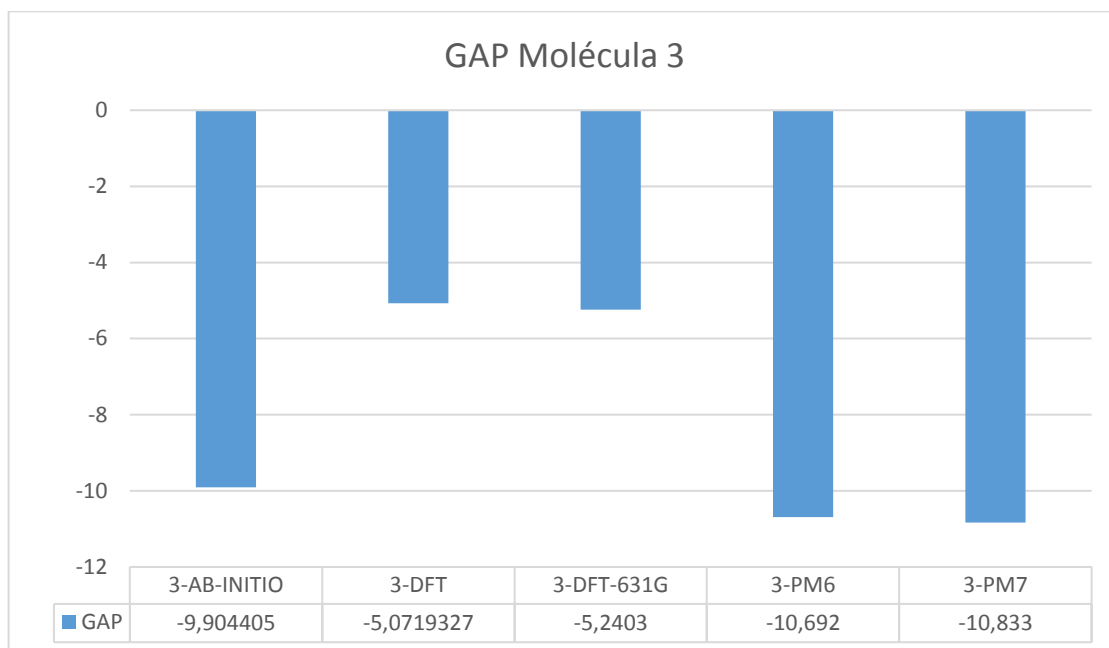
Fonte: Própria (2017)

Figura 10 - GAP da Molécula 2



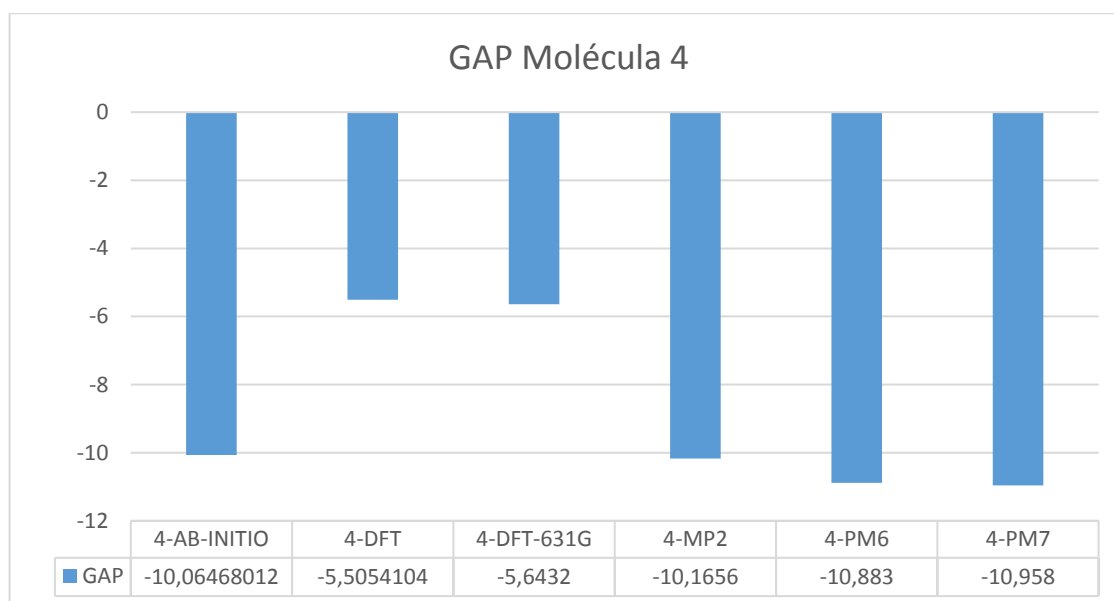
Fonte: Própria (2017)

Figura 11 - GAP da Molécula 3



Fonte: Própria (2017)

Figura 12 - GAP da Molécula 4



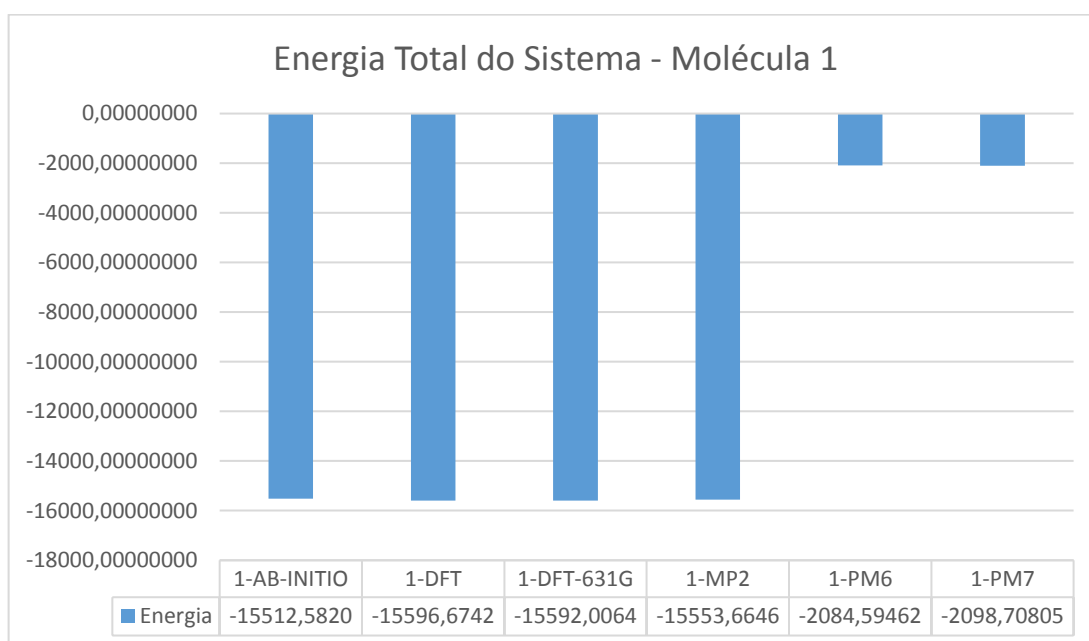
Fonte: Própria (2017)

O esperado era que o GAP dos métodos quânticos fornecesse um maior valor, mostrando que o composto é mais estável. Mas o fato dos métodos semi-empíricos fornecerem um valor maior é que os métodos sobrestimam os valores de GAP, assim como os valores de calor de formação, sendo os mesmos mais confiáveis para a obtenção de estruturas. O método

MP2 não esteve presente nas moléculas 2 e 3 pois a demanda computacional foi maior do que poderíamos oferecer, sendo assim um método inviável.

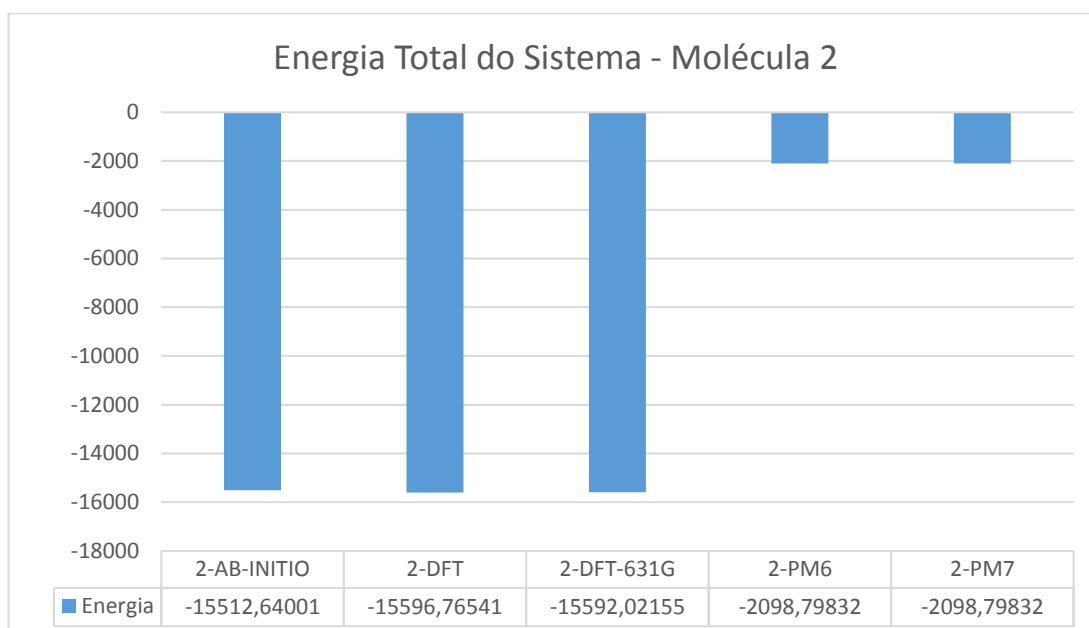
Analisando agora a energia total do sistema, dada em elétron volt, que é o parâmetro mais importante nos resultados, de acordo com os gráficos:

Figura 13 - Energia Total do Sistema - Molécula 1



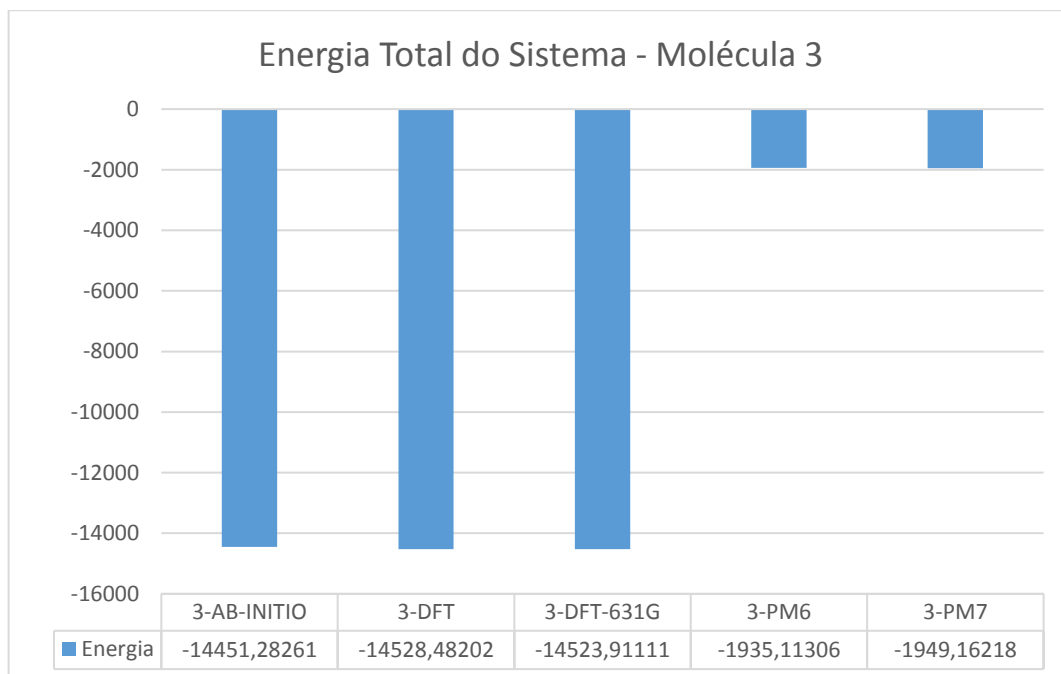
Fonte: Própria (2017)

Figura 14 - Energia Total do Sistema - Molécula 2



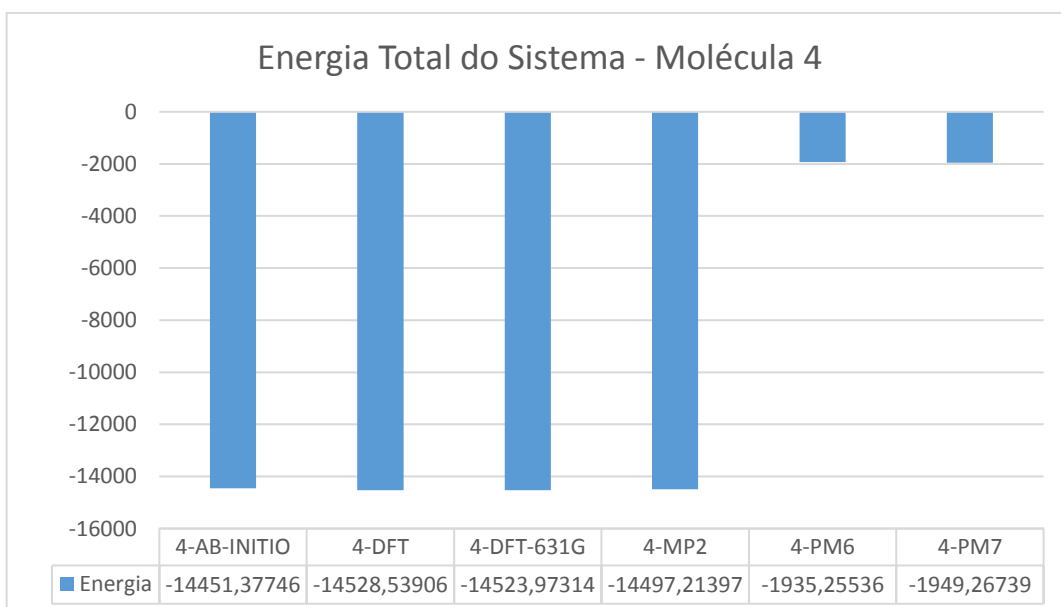
Fonte: Própria (2017)

Figura 15 - Energia Total do Sistema - Molécula 3



Fonte: Própria (2017)

Figura 16 - Energia Total do Sistema - Molécula 4



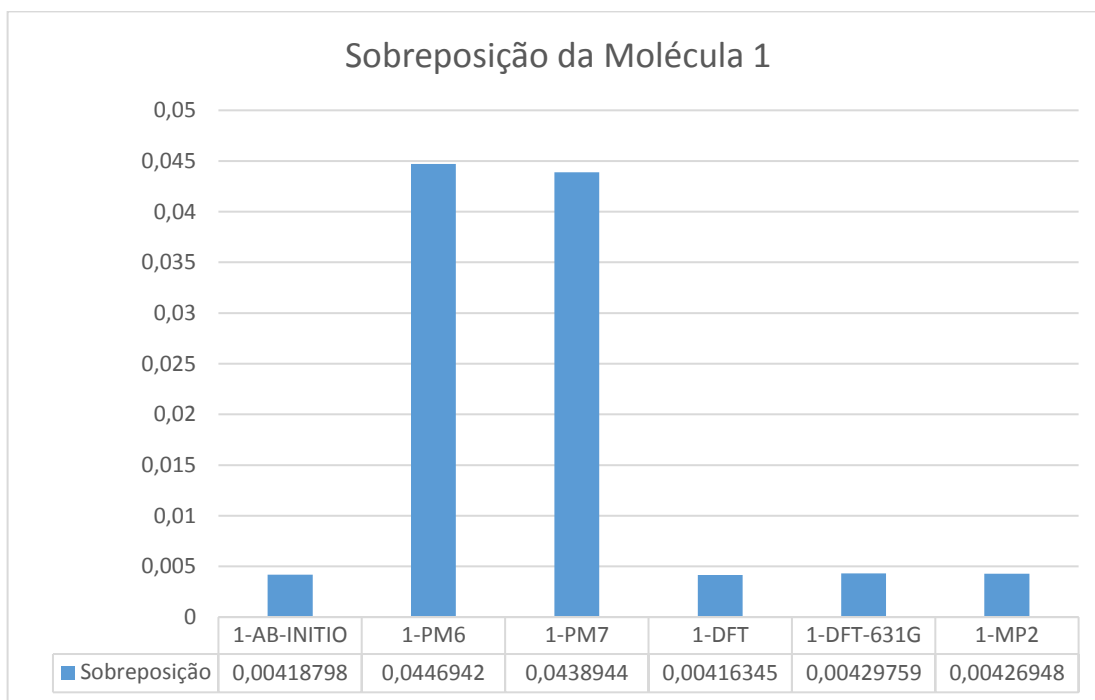
Fonte: Própria (2017)

Analisando os gráficos nota-se um padrão nas quatro moléculas, em que para os cálculos quânticos foram obtidas as menores energias, ou seja, maior estabilidade para as moléculas,

tendo uma variação mínima entre os cálculos quânticos e entre os dois cálculos semi-empíricos, e ainda percebe-se que a diferença de energia entre o quântico e o semi-empírico é muito grande, obtendo valores mais confiáveis nos métodos quânticos.

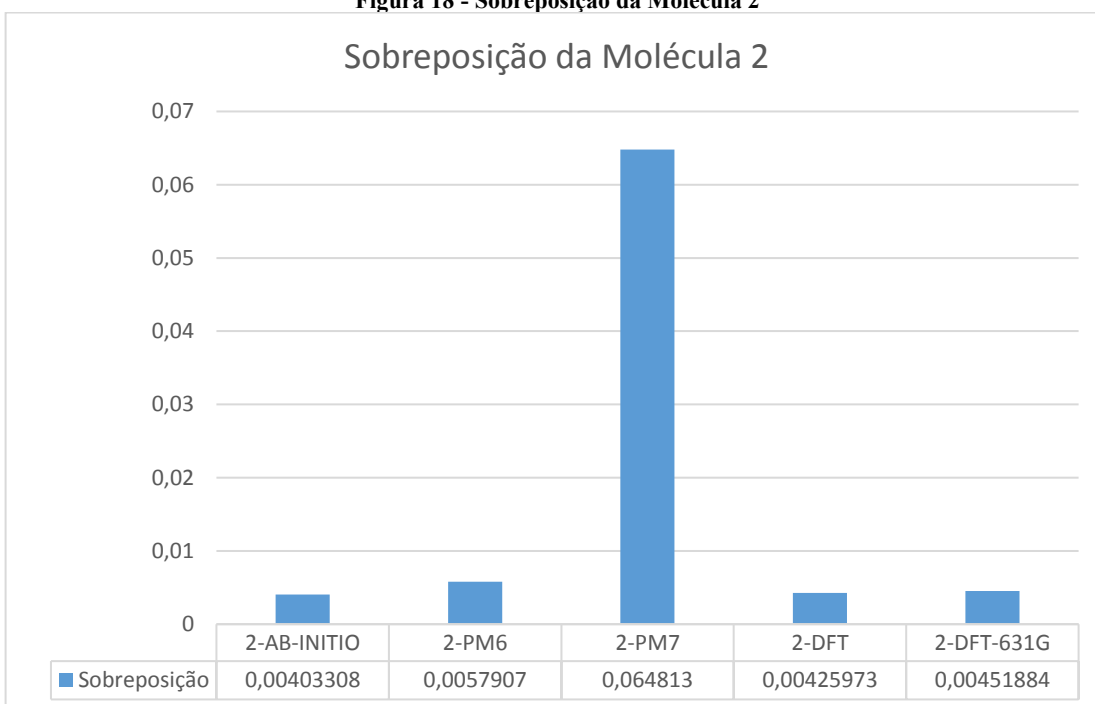
Agora, analisando a sobreposição das estruturas obtidas nos cálculos com a estrutura cristalográfica, real:

Figura 17 - Sobreposição da Molécula 1



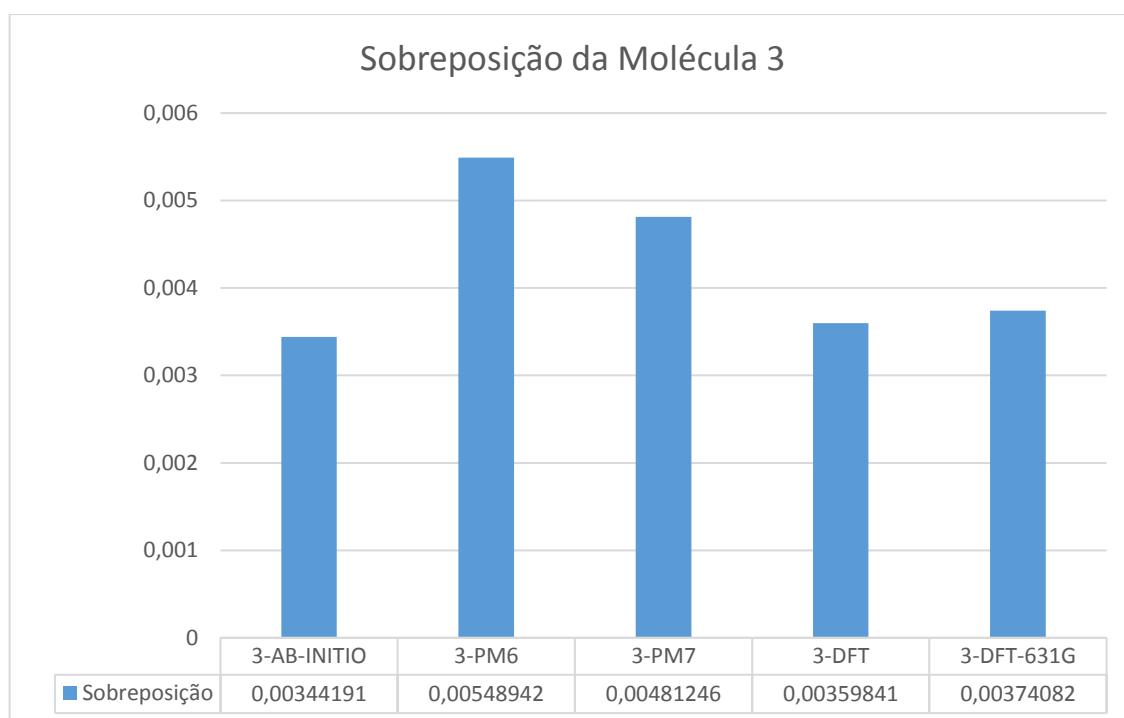
Fonte: Própria (2017)

Figura 18 - Sobreposição da Molécula 2



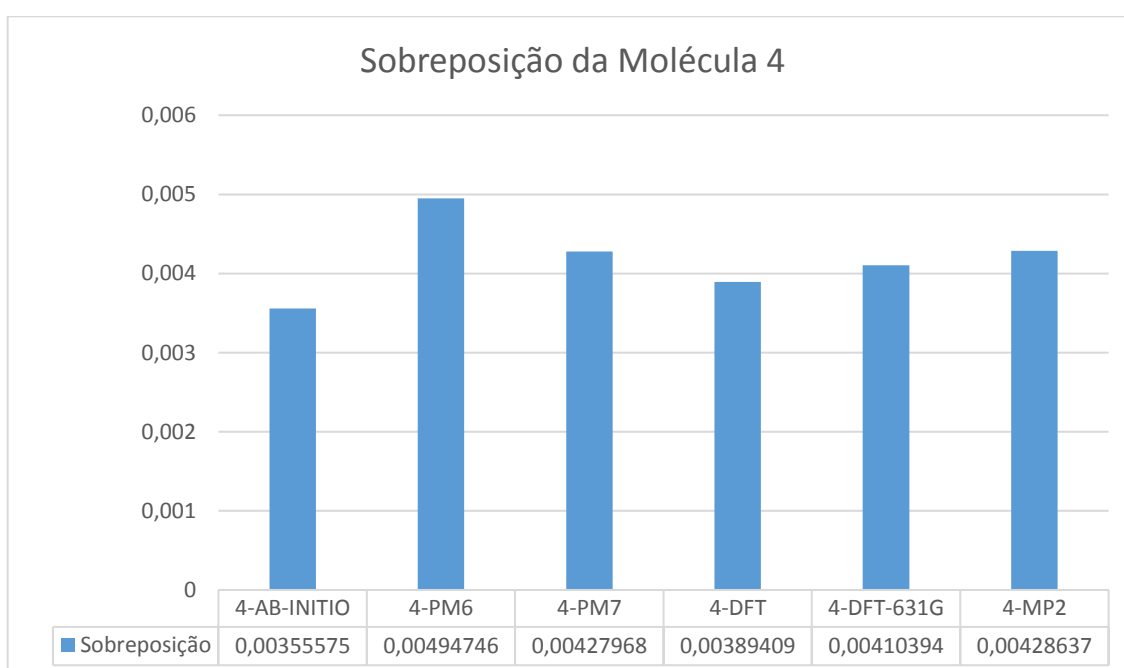
Fonte: Própria (2017)

Figura 19 - Sobreposição da Molécula 3



Fonte: Própria (2017)

Figura 20 - Sobreposição da Molécula 4



Fonte: Própria (2017)

Os valores fornecidos na tabela são em nanômetros, e pode-se interpretar que quanto menor o desvio, mais próxima da molécula real estão as estruturas. O método AB-INITIO, em todas as moléculas foi o que forneceu o menor valor do desvio, obtendo assim o valor mais próximo do real, sendo o melhor método para esta análise. Seguido do método DFT e DFT-631G.

5 CONCLUSÃO

De acordo com os parâmetros analisados, o método DFT-631G é o mais aplicável para moléculas como as derivadas de benzofuranonas. Por mais que energeticamente o método DFT com a função de base 6-311++G(d,p) tenha fornecido um melhor valor, a diferença energética foi muito pequena, e comparando o tempo gasto para o cálculo de três dias para o DFT e três horas para o DFT-631G, o segundo traz melhores resultados, até em relação ao cotidiano laboratorial, no número de computadores e seu processamento com o número de pesquisadores. O cálculo quântico demanda processamento da máquina, então o tempo deve ser levado em consideração, uma vez que quando o computador está fazendo vários cálculos o mesmo fica incapaz de realizar suas tarefas com excelência.

6 REFERÊNCIAS

- ARNONE, A., ASSANTE, G., NASINI, G., STRADA, S. & VERCESI, A. (2002). *J. Nat. Prod.* 65, 48–50.
- ARRUDA, P. M. **Algumas considerações sobre conjuntos de bases para cálculos de propriedades elétricas**. Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Espírito Santo, Centro de Ciências Exatas. Vitória, 2009.
- ATKINS, P.; DE PAULA, J.; FRIEDMAN, R. **Quanta, matter, and change: A Molecular Approach to Physical Chemistry**. Cengage Learning: New York, 2009.
- ATKINS, P.; FRIEDMAN, R. **Molecular Quantum Mechanics**. 4. ed. Oxford; New York: Oxford University Press Inc., 2005.
- BARREIRO, E. J.; RODRIGUES, C. R. **Modelagem molecular: uma ferramenta para o planejamento racional de fármacos em química medicinal**. *Química Nova*, v. 20, n. 1, p. 1–11, 1997.
- BRADY, S. F., WAGENAAR, M. M., SING, M. P., JANSON, J. E. & CLARDY, J. **Org. Lett.** 2, 4043–4046, 2000.
- BUNGE, A. V. **Introdução à Química Quântica**. São Paulo: Edgard Blucher, 1977. 410p.
- BURKE, K. **Perspective on density functional theory**. *The Journal of chemical physics*, v. 136, n. 15, p. 150901, 2012.
- CARDOZO, J. A., FILHO, R. B., VELANDIA, J. R. & PABO, N. M. F. G. (2005). **Rev. Col. Cienc. Quim. Farm.** 34, 69–79.
- CASTRO M. A. E CANUTO S., ED. MORGON N. H. E COUTINHO K. **Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular**. Editora Livraris da Física, São Paulo, 2007.
- COHEN, A. J.; MORI-SÁNCHEZ, P.; YANG, W. **Challenges for density functional theory**. *Chemical reviews*. V. 112, n. 1, p. 289–320, 2012.
- DAVID J. GRIFFITHS. **Introduction to Quantum Mechanics**. 1995 by Prentice Hall, Inc.
- DEWAR, M. J. S.; THIEL, W. **A Semiempirical Model for the Two-Center Repulsion Integrals in the NDDO Formalism**. *Theor. Chim. Acta*, v. 46, p. 89-104, 1977a.
- DEMUNER, A. J., BARBOSA, L. C. A., VEIGA, T. A. M., BARRETO, R. W., KING-DIAZ, B. & LOTINA-HENNSSEN, B. **Biochem. Syst. Ecol.** 34, 790–795, 2006.
- DEWAR, M. J. S. **AM1: A New General Purpose Quantum Mechanical Molecular Model**. *J. Am. Chem. Soc.*, v. 107, n. 13, p. 3902-3909, 1985.

- FRIESECKE, G. **The multiconfiguration equations for atoms and molecules: Charge quantization and existence of solutions**. Arch. Rational Mech. Anal. 169, 35, 2003.
- FROESE-FISCHER, C., **The Hartree-Fock method for atoms**, Wiley: New York, 1977.
- FUKUI, K.; YONEZAWA, T.; SHINGU, H. **A molecular orbital theory of reactivity in aromatic hydrocarbons**. The Journal of Chemical Physics 1952, 20, 722.
- GOMES, A. S. P.. **Avaliação de métodos de integração numérica na discretização de transformadas Integrais**. 2001 – Dissertação de mestrado, UNICAMP.
- HUANG, X.-Z., ZHU, Y., GUAN, X.-L., TIAN, K., GUO, J.-M., WANG, H.-B. & FU, G.-M. **Molecules**, 17, 4219–4224, 2012.
- ICHINO, T.; YOSHIOKA, Y. **Which oxidation state is preferable at S0 state in oxygen-evolving complex, Mn₄(II, III, IV, IV) or Mn₄(III, III, III, IV)? A B3LYP study**. Chemical Physics Letters, v. 545, p. 107–111, 2012. Elsevier B.V.
- KADUK, B.; KOWALCZYK, T.; VOORHIS, T. VAN. **Constrained density functional theory**. Chemical reviews, v. 112, n. 1, p. 321–70, 2012.
- KLOPPER, W. E KUTZELNIGG, W. **Journal of Molecular Structure**, 135, 339, 1986.
- LASCHUK, E. F. **Novo Formalismo Semi-Empírico para Cálculos QuímicoQuânticos**. 2005. 143 f. Tese (Doutorado em Química) – Programa de Pós-Graduação em Química, Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2005.
- LEVINE, I. N. **Quantum Chemistry**, 5ed. Brooklyn, New York. Pretice Hall, 2000.
- LOGRADO, L.P.L., SANTOS, C.O., ROMEIRO, L.A.S., COSTA, A.M., FERREIRA J.R.O., CAVALCANTI, B.C., MORAES, M.O. DE, COSTA-LOTUFO, L.V., PESSOA, C., DOS SANTOS, M.L. **Eur. J. Med. Chem.** 45 (2010) 3480–3489.
- LOWDIN, P. O. **Studies of Atomic Self-Consistent Fields. I. Calculation of Slater Functions**, Phys. Rev. 90, 120, 1953.
- MA, F., GAO, Y., QIAO, H., HU, X. & CHANG, J. J. **Thromb. Thrombolysis**, 33, 64–73, 2012.
- MARTINS, Lucas S. C. **Conjunto de Bases Gaussianas Aumentado de Qualidade Quádrupla Zeta de Valência para os Átomos K e Sc–Kr: aplicação em cálculos HF, MP2 e DFT de propriedades elétricas moleculares**. 2013. 77f. Dissertação (Mestrado em Física) – Programa de Pós-Graduação em Física, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, 2013.
- MCWEENY, R. **Quantum-mechanics: methods and basic applications**. New York: Pergamon Press, 1973. 243p.

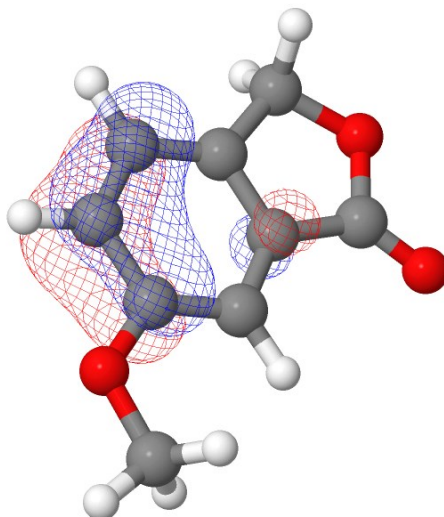
- MOLFETTA, F. A. **Planejamento de quinonas com atividade tripanossomicida**. Tese de doutorado, São Paulo, 2007.
- MUSSO, F.; UGLIENGO, P.; SODUPE, M. **Do H-bond features of silica surfaces affect the H₂O and NH₃ adsorption? Insights from periodic B3LYP calculations**. The journal of physical chemistry. A, v. 115, n. 41, p. 11221–8, 2011.
- NETO, J. A. M., **Dímeros cíclicos de derivados do ácido metanoico: um estudo computacional de propriedades moleculares, topológicas e do efeito cooperativo**. Dissertação (Mestrado) – UFPB/CCEN, Paraíba, 2015.
- OLIVEIRA, Heibbe C. B. de. **Um Procedimento Analítico para o Cálculo das Integrais Bieletrônicas em Métodos de Mecânica Quântica Molecular**. 2008. 186 f. Tese (Doutorado em Química) – Programa de Pós-Graduação em Química, Instituto de Química, Universidade de Brasília, Brasília, 2008.
- PARR, R.G. **The Quantum Theory of Molecular Eletronic Structure**. New York. Benjamin, 1963. 530p.
- PEREIRA, A. M. **Estudo ab-initio e dft das nitrosaminas**. Universidade Federal da Paraíba, 2008.
- RINKE, P. **Eletronic Structure Theory**. Fritz Haber Institute – Max Planck Society. Berlin, 2014.
- SANTOS, M. G.. **Desenvolvimento de funções de base GTO: Aplicação do método da coordenada Geradora através da técnica de discretização Integral Otimizada**, 1992 – Dissertação de mestrado - Unicamp.
- J.A. CARDOZO, R. BRAZ-FILHO, J. RINCÓN-VELANDIA, M.F. GUERRERO-PABÓN, **REV. COL. Cienc. Quím. Farm.** 34 (2005) 69–76.
- X.-Z. HUANG, Y. ZHU, X.-L. GUAN, K. TIAN, J.-M. GUO, H.-B. WANG, G.-M. FU. **Molecules** 17 (2012) 4219–4224.
- F. MA, Y. GAO, H. QIAO, X. HU, J. CHANG, J. THROMB. **Thrombolysis** 33 (2012) 64–73.
- K. YOGONATHAN, C. ROSSANT, S. NG, Y. HUANG, M.S. BUTLER, A.D. BUSS, J. **NAT. Prod.** 66 (2003) 1116–1117.
- D. MAL, P. PAHARI. **Chem. Rev.** 107 (2007) 1892–1918.
- B.A. EGAN, M. PARADOWSKI, L.H. THOMAS, R. MARQUEZ, **org. Lett.** 13 (2011) 2086–2089.
- SZABO A. E OSTLUND N. S. **Modern Quantum Chemistry. Introdution to Advanced Eletronic Structure Theory**, Dover, New York, 1982.

- SZABO A., A. AND OSTLUND, N. S. **Modern Quantum Chemistry**, Dover Publications. New York, 1989.
- STEWART. **Optimization of parameters for semiempirical methods VI: more modifications to the NDDO approximations and re-optimization of parameters**. J. Mol. Model., v. 19, p. 1-32, 2013.
- WEISS, L.I. **Estudo dos Efeitos de Absorção no Espalhamento de Elétrons por Moléculas pelo Método de Frações Continuadas**. 2013. 145 f. Tese (Doutorado em Física) – Programa de Pós-Graduação em Física, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2013.
- YOGANATHAN, K., ROSSANT, C., NG, S., HUANG, Y., BUTLER, M. S. & BUSS, A. D. **J. Nat. Prod.** 66, 1116–1117, 2003.
- ZHANG, G.; MUSGRAVE, C.B.; **Comparison of DFT Methods for Molecular Orbital Eigenvalue Calculations**, J. Phys. Chem. A. 111, 1554-1561. 2007.
- ZHAO, N., JI, M.-X., XU, L. & JI, B.-S. **Drug. Dev. Res.** 73, 11–17, 2012.

7 ANEXOS

compostol.mgf
Model 1.1 MO 31/56
Energy = -11.667301 eV
Occupancy = 2.0

ANEXO - Figura 21 - Composto 1 - HOMO

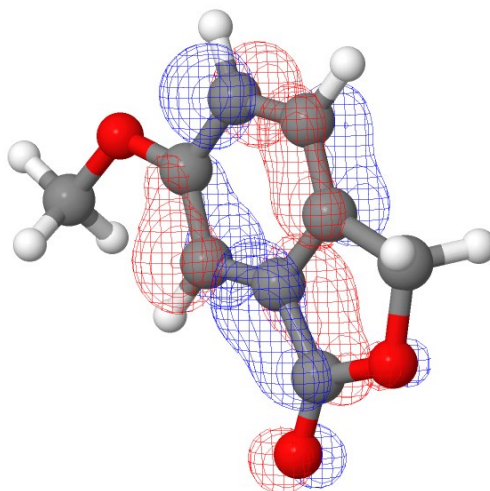


Jmol

Fonte: Própria (2017) criado no programa Jmol

compostol.mgf
Model 1.1 MO 32/56
Energy = -0.86410004 eV
Occupancy = 0.0

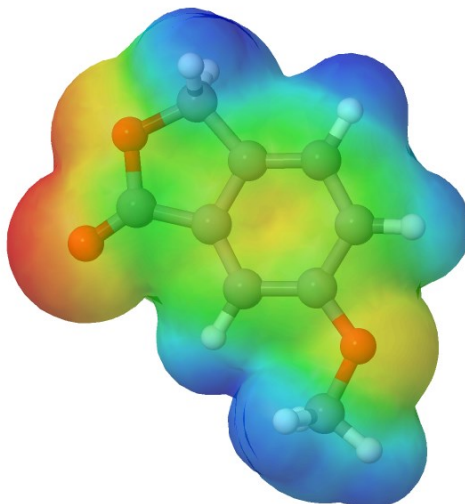
ANEXO - Figura 22 - Composto 1 - LUMO



Jmol

Fonte: Própria (2017) criado no programa Jmol

ANEXO - Figura 23 - Composto 1 - Potencial Eletrostático

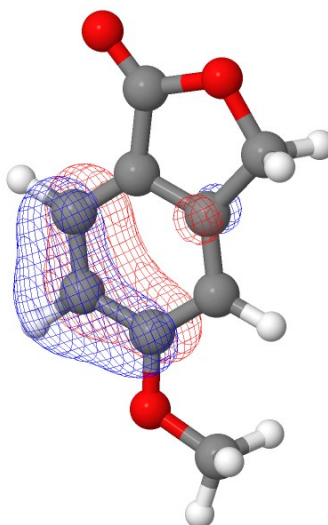


Jmol

Fonte: Própria (2017) criado no programa Jmol

ANEXO - Figura 24 - Composto 2 - HOMO

composto2.mgf
Model 1.1 MO 31/56
Energy = -11.6027 eV
Occupancy = 2.0

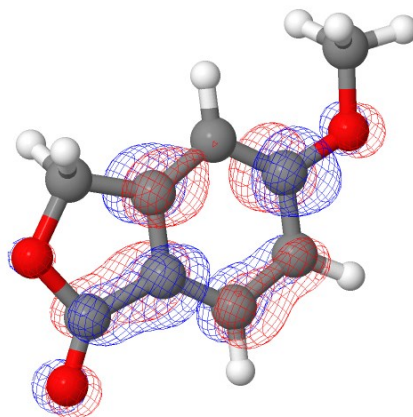


Jmol

Fonte: Própria (2017) criado no programa Jmol

composto2.mgf
Model 1.1 R0 32/56
Energy = -0.66480005 eV
Occupancy = 0.0

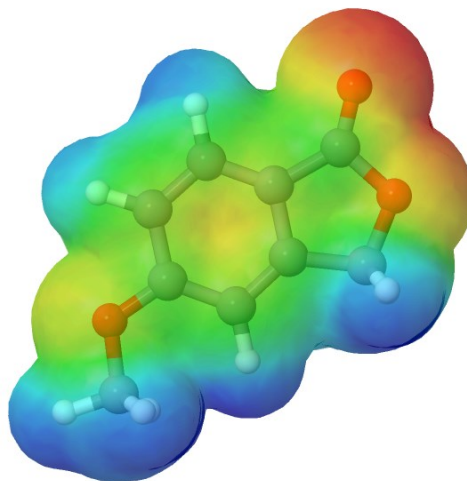
ANEXO - Figura 25 - Composto 2 - LUMO



Jmol

Fonte: Própria (2017) criado no programa Jmol

ANEXO - Figura 26 - Composto 2 - Potencial eletrostático

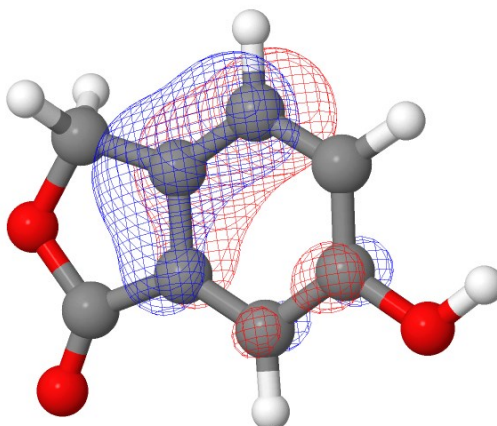


Jmol

Fonte: Própria (2017) criado no programa Jmol

composto3.mgf
Model 1.1 MO 28/50
Energy = -11.8359 eV
Occupancy = 2.0

ANEXO - Figura 27 - Composto 3 - HOMO

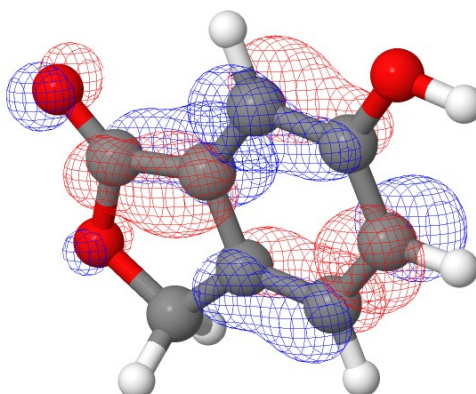


Jmol

Fonte: Própria (2017) criado no programa Jmol

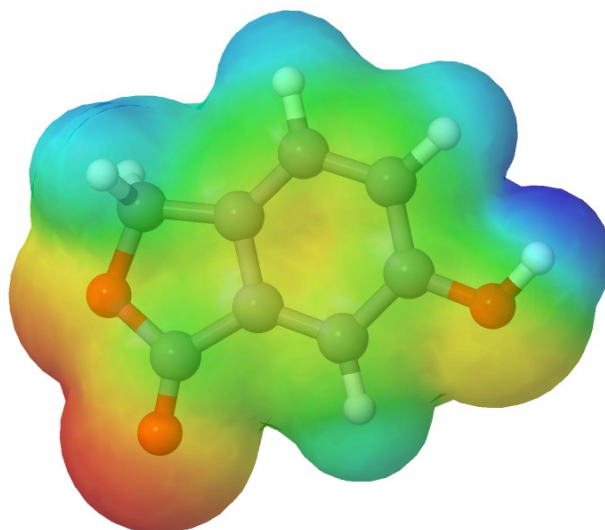
composto3.mgf
Model 1.1 MO 29/50
Energy = -1.0026 eV
Occupancy = 0.0

ANEXO - Figura 28 - Composto 3 - LUMO



Jmol

Fonte: Própria (2017) criado no programa Jmol

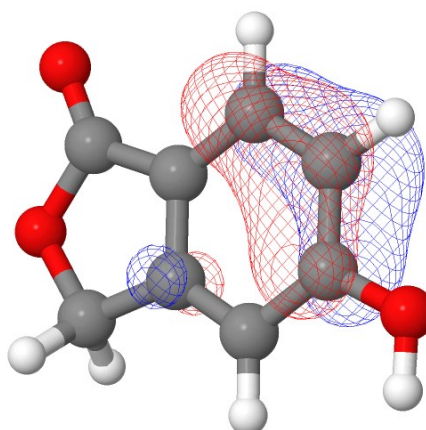
ANEXO - Figura 29 - Composto 3 - Potencial eletrostático

Jmol

Fonte: Própria (2017) criado no programa Jmol

ANEXO - Figura 30 - Composto 4 - HOMO

composto4.mgf
Model 1.1 M0 28/50
Energy = -11.76 eV
Occupancy = 2.0

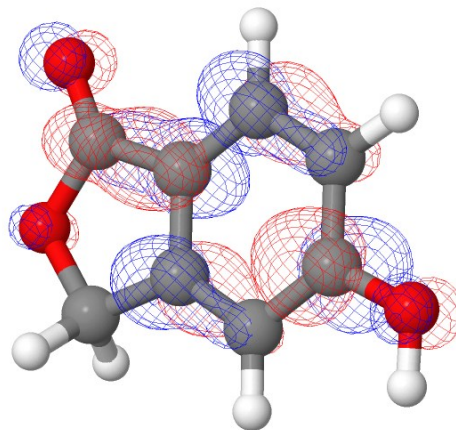


Jmol

Fonte: Própria (2017) criado no programa Jmol

composto4.mgf
Model 1.1 R0 29/50
Energy = -0.8016 eV
Occupancy = 0.0

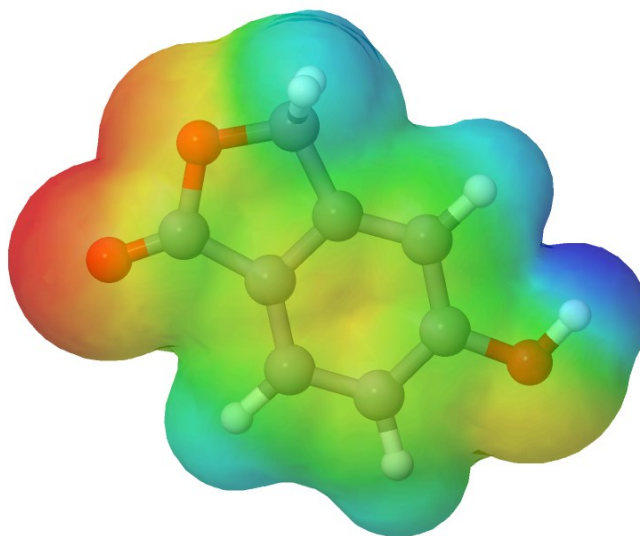
ANEXO - Figura 31- Composto 4 - LUMO



Jmol

Fonte: Própria (2017) criado no programa Jmol

ANEXO - Figura 32 - Composto 4 - Potencial eletrostático



Jmol

Fonte: Própria (2017) criado no programa Jmol