

APLICAÇÃO DE MÉTODOS DE DFT NAS PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS: UM ESTUDO TEÓRICO DOS DÍMEROS

Guilherme R. Araújo^{1*}; Rafaela G. Faustino²; Ricardo C. Soares³; Raquel A. de Araújo Costa⁴; José de B. M. Neto⁵; Aparecida H. Medeiros do Carmo⁶; Raquel M. T. Fernandes⁷; Alamgir Khan⁸

¹⁻²Univesidade Estadual do Maranhão, Graduando em Licenciatura em Química, Itapecuru-Mirim, Maranhão, Brasil, 65485-000.

³Univesidade Estadual do Maranhão, Graduando em Licenciatura em Química, Viana, Maranhão, Brasil, 65215-000.

⁴Univesidade Estadual do Maranhão, Graduanda em Licenciatura em Química, São Luís, Maranhão, Brasil, 65055-310.

⁵⁻⁶Univesidade Estadual do Maranhão, Pós-Graduação em Engenharia Aeroespacial/PPGEA, São Luís, Maranhão, Brasil, 65055-310.

⁷⁻⁸Univesidade Estadual do Maranhão, Departamento de Química/CECEN, São Luís, Maranhão, Brasil, 65055-310.

*e-mail: guilherme.araujo1201@gmail.com

A Teoria do Funcional de Densidade, baseada nos trabalhos de Kohn, Hohenbeng e Sham (DFT - Density Functional Theory), teve uma ascensão significativa na última década, sendo amplamente utilizada na mecânica quântica e tendo um grande impacto nas ciências durante os anos de 1964 e 1965. Com a chegada dos computadores do século XX, facilitou as atividades no dia a dia e não foi diferente na química; o uso de computadores dessa área ficou conhecido como “Química Computacional”, destacando-se a eficiência computacional na descrição de sistemas eletrônicos complexos, cálculos analíticos de gradientes de energia, matriz hessiana, entre outros, à parte do DFT¹⁻³. Neste trabalho, realizou-se um estudo computacional utilizando modelos teóricos de mecânica quântica com o objetivo de compreender os aspectos termodinâmicos dos dímeros de CO₂, NO₂, CH₄, SO₂, C₂H₂ e NO, utilizando os funcionais APFD, B3LYP, LSDA, PBEPBE e TPSSTPSS, combinados com uma função base **aug-cc-pVDZ**. Para construir os dímeros e configurar, foi usado o GaussView com visualização tridimensional. O Gaussian 09W foi utilizado para otimizar as geometrias e extrair as propriedades químicas e físicas por meio de matriz hessiana. Os dados foram inseridos do Excel e organizados, transformando alguns valores de Hartree em quilojoules por mol. Tenho a finalidade de serem analisados e comparar os métodos funcionais. O TPSSTPSS chama atenção pela sua energia baixa de interação (E_h), o que evidencia uma maior estabilidade no sistema, com uma interação parcialmente mais forte entre os dímeros de (CO₂). Para sistema com interações fracas, como C₂H₂ + C₂H₂, os funcionais híbridos no caso B3LYP são uma ótima opção. Aliás, o B3PLY e TPSSTPSS lideram, tenho os valores mais negativos, revelando sua consistência e confiabilidade em todos os dímeros. No APFD, tenho a distância de interação (Å) com uma proximidade maior entre moléculas de óxido nítrico do que no B3PLY, indicando uma interação mais intensa, porém não se traduz em maior estabilidade, possivelmente porque a dispersão não é o fator dominante na interação entre duas moléculas de (NO), diferente do B3PLY, que trata bem molécula dipolo-dipolo. O método LSDA na energia de interação é o menos negativo em comparação aos outros funcionais com todos os dímeros, sendo o PBEPBE intermediário. Esse estudo transparece a importância da formação de dímeros e suas características, de acordo com métodos funcionais, para a compreensão dos fenômenos moleculares e térmicos por meio da Química Computacional, uma área promissora da ciência.

Agradecimentos: Essa pesquisa foi realizada com financiamento do Programa Institucional de Bolsas de Iniciação em Desenvolvimento Tecnológico e Inovação – PIBITI/UEMA, agradece ao Professor Alamgir Khan (Orientador), aos colegas, ao laboratório Planck-Boltmann – Química Teórica e Aplicada e ao Departamento de Química da UEMA.

[1] HOHENBERG, P.; KOHN, W. Inhomogeneous electron gas. Physical review,APS, v. 136, n. 3B, p. B864, 1964.

[2] KOHN, W.; SHAM, L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. Physical review, APS, v. 140, n. 4A, p. A1133, 1965.

[3] RODRIGUES, Sérgio Paulo Jorge; CARIDADE, Pedro. História da química computacional e do uso dos computadores em química. História da Ciência e Ensino: construindo interfaces, v. 25, p. 140-153, 2022.