

# INVESTIGANDO PROPRIEDADES ATÔMICAS E MOLECULARES DE HALOMETANOS UTILIZANDO A QUÍMICA COMPUTACIONAL

Aline Fonseca Bezerra<sup>1</sup>(PG)\*, Kelson Carvalho Lopes<sup>1</sup>(PQ), Regiane C.M.U. Araújo<sup>1</sup>(PQ)

1 – Universidade Federal da Paraíba – Campus I. [\\*alineafb@yahoo.com.br](mailto:*alineafb@yahoo.com.br)

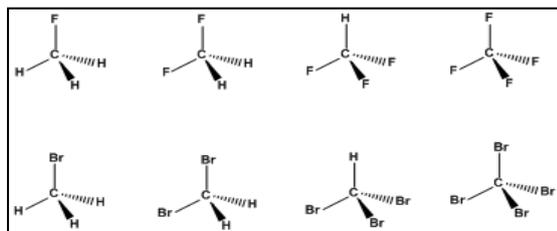
Palavras-Chave: Química Computacional, Ensino de Química.

## Introdução

Com o passar dos anos vivenciamos cada vez mais a utilização das tecnologias a serviço do ensino e aprendizagem. O computador tem se tornado uma ferramenta de fácil acesso para alunos de diversas regiões do país, porém sua utilização nem sempre é destinada para fins educativos. A Química Computacional pode ser muito bem utilizada neste contexto no sentido de atrair a atenção do aluno para as mudanças que podem ocorrer numa reação química, por exemplo. Vários programas possuem uma interface gráfica onde o aluno pode visualizar propriedades que em sala de aula são difíceis de serem compreendidas. Neste contexto este trabalho se propõe a avaliar as modificações que ocorrem em determinadas substâncias químicas através de métodos computacionais.

## Resultados e Discussão

Para investigar as modificações nas propriedades moleculares que ocorrem devido à substituição de halogênio nos alcanos selecionamos os compostos abaixo para serem investigados.



**Figura 1.** Haloalcanos propostos para estudo – fluorometano, difluorometano, trifluorometano, tetrafluorometano, bromometano, dibromometano, tribromometano, tetrabromometano.

Os cálculos serão realizados com o programa Gaussian 09<sup>1</sup>, os resultados podem ser visualizados com o programa Gauss View 5.0<sup>2</sup>. Serão realizados cálculos de otimização de geometria e frequência vibracional para todos os compostos propostos através de um planejamento fatorial 2<sup>4</sup> conforme pode ser visto na Tabela 1. Os cálculos foram realizados por alunos do ensino médio de uma escola pública de João Pessoa/PB dentro do programa de bolsas PIBIC-EM.

**Tabela 1.** Funções de onda usadas no Planejamento Fatorial 2<sup>4</sup> para obtenção de propriedades de interesse dos Haloalcanos

Função de Onda	Fatores			
	1 val	2 Dif	3 Pol	4 Corr
1 HF/6-31G	-	-	-	-
2 HF/6-311G	+	-	-	-
3 HF/6-31++G	-	+	-	-
4 HF/6-311++G	+	+	-	-
5 HF/6-31G(d,p)	-	-	+	-
6 HF/6-311G(d,p)	+	-	+	-
7 HF/6-31++G(d,p)	-	+	+	-
8 HF/6-311++G(d,p)	+	+	+	-
9 CE/6-31G	-	-	-	+
10 CE/6-311G	+	-	-	+
11 CE/6-31++G	-	+	-	+
12 CE/6-311++G	+	+	-	+
13 CE/6-31G(d,p)	-	-	+	+
14 CE/6-311G(d,p)	+	-	+	+
15 CE/6-31++G(d,p)	-	+	+	+
16 CE/6-311++G(d,p)	+	+	+	+
1. Conjunto de base (val):	(-) 6-31G / (+) 6-311G;			
2. Funções Difusa (Dif):	(-) Ausente / (+) Presente;			
3. Funções de Polarização (Pol):	(-) Ausente / (+) Presente;			
4. Correlação Eletrônica (Corr):	(-) Hartree-Fock (HF) / (+) Correlação Eletrônica (CE), onde CE= MP2 ou B3LYP;			

Os resultados obtidos mostraram que para as distâncias de ligação C-F e C-Br, tanto para MP2 quanto para o funcional B3LYP, os efeitos principais 1(HF/6-311G) e 3(HF/6-31G(d,p)), diminuem as distâncias enquanto que os efeitos principais 2(HF/6-31++G) e 4(MP2 ou B3LYP/6-31G)), aumentam essas distâncias. O efeito de interação 34 para os cálculos MP2, representado pelo cálculo MP2/6-31G(d,p), também se mostraram significativos, sendo esta interação responsável pela diminuição das distâncias de C-F e C-Br.

## Conclusões

Com a inclusão do planejamento fatorial às técnicas de química computacional os alunos puderam entender melhor o comportamento das propriedades moleculares. Alguns alunos associaram a metodologia utilizada no planejamento fatorial à utilizada na análise combinatória, facilitando o aprendizado.

## Agradecimentos

UFPB, CNPq

1 - GAUSSIAN 09, Revision A.1., Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.

2 - GaussView, Version 5, Dennington, R.; Keith, T.; Millam, J. *Semichem Inc.*, Shawnee Mission KS, 2009.