

Uso dos métodos B3LYP e MPW1K na previsão dos momentos de dipolo de pequenos cianopoliinos e isocianopoliinos

Rafael M. Vichiatti (PG)*, Roberto L. A. Haiduke (PQ) *vichiatti_rm@yahoo.com.br*
Departamento de Química e Física Molecular, Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, CP 780, CEP 13560-970, São Carlos, SP, Brasil.
Palavras-chave: momentos de dipolo, cianopoliinos, isocianopoliinos, DFT

Introdução

Cianopoliinos, de fórmula geral HC_nN ($n = 1, 3, 5, \dots$), têm sido objeto de amplo estudo laboratorial e radioastronômico. Contudo, pouco se sabe sobre seus isômeros, os isocianopoliinos, de fórmula geral HC_{n-1}NC . Alguns membros destas duas famílias moleculares já foram detectados em nuvens interestelares e tal fato é importante para ilustrar o papel que reações íon-molécula desempenham na formação de grandes cadeias moleculares nestes ambientes astrofísicos.¹ Com o intuito de fornecer dados para futuras detecções no meio interestelar, o objetivo deste trabalho é estimar a eficiência de dois métodos da Teoria do Funcional de Densidade (DFT), o B3LYP e o MPW1K, na determinação dos momentos de dipolo dessas moléculas com $n = 1$ até 7, quando utilizadas as bases cc-pVQZ e aug-cc-pVQZ.

Resultados e Discussão

Os resultados obtidos estão apresentados na Tabela 1. De forma geral, os momentos de dipolo fornecidos pelo método B3LYP são mais próximos dos valores experimentais do que aqueles dados pelo MPW1K. Além disso, em ambos os métodos, a adição de funções difusas tem pouco efeito sobre os resultados obtidos, acarretando diferenças máximas de 0,02 Debye.

Tabela 1: Momentos de dipolo teóricos e experimentais (Debye) de cianopoliinos e isocianopoliinos.

Molécula	B3LYP/ cc-pVQZ	B3LYP/ aug-cc-pVQZ	MPW1K/ cc-pVQZ	MPW1K/ aug-cc-pVQZ	Exp.
HNC	3,06	3,06	3,06	3,06	3,05 ²
HC ₂ NC	2,94	2,95	2,84	2,85	2,93 ³
HC ₄ NC	3,26	3,27	3,09	3,09	-
HC ₆ NC	3,58	-	3,34	3,34	-
HCN	3,02	3,04	3,08	3,10	2,99 ⁴
HC ₃ N	3,87	3,89	3,92	3,94	3,73 ⁴
HC ₅ N	4,64	4,66	4,65	4,67	4,33 ⁵

Conclusões

É possível concluir que o método B3LYP apresenta resultados mais próximos dos experimentais do que o MPW1K e que o uso da base aug-cc-pVQZ não melhora os resultados com ambos os métodos utilizados, quando comparada com a base cc-pVQZ.

Agradecimentos:

Agradecemos à FAPESP, à CAPES e ao CNPQ pelo suporte financeiro.

Referências

- HERBST, E., *Astrophysical Journal*, 1978, 222, 508.
- BLACKMAN, G. L. et al., *Nature*, 1976, 261, 395.
- RISSI, E.; RIVELINO, R.; CANUTO, S., *International Journal of Quantum Chemistry*, 2002, 91, 575.
- LANDOLT-BÖRNSTEIN, *Numerical Data and Functional Relationship in Science and Technology*, New Series, II/19c, 1992, Springer-Verlag, Heidelberg.
- LISZT, H. S.; PETY, J.; LUCAS, R., *Astronomy & Astrophysics*, 2008, 486, 493.