

# **SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE PROPRIEDADES ELÉTRICAS DA L-ARGININA FOSFATADA MONOHIDRATADA INCLUINDO EFEITOS DE POLARIZAÇÃO DO AMBIENTE (APOIO UNIP)**

**Aluna:** Marcela Santos Gomes

**Orientador:** Prof. Dr. Clodoaldo Valverde

**Curso:** Engenharia Civil

**Campus:** Goiânia

O momento de dipolo, a polarizabilidade linear e a primeira hiperpolarizabilidade da unidade assimétrica da L-arginina Fosfatada Monohidratada são investigados por meio de uma abordagem de supramolecular em combinação com um esquema iterativo de interação eletrostática em que as moléculas envolvidas são representadas como cargas pontuais. Neste trabalho, analisou-se a convergência das propriedades elétricas após o aumento do número de moléculas circundantes à central. A rápida convergência é apresentada por todas as propriedades elétricas, sugerindo que esta abordagem eletrostática pode representar um caminho viável para estimar as propriedades elétricas em cristais orgânico-inorgânicos. Em comparação com os resultados aos valores da L-arginina Fosfatada Isolada, os resultados da aproximação MP2 com a base 6-311+G(d) mostram que os efeitos de polarização, devido à incorporação eletrostática supramolecular, levam a um aumento do momento de dipolo; já o efeito do ambiente cristalino minimiza os efeitos das interações intermoleculares nas propriedades elétricas.