

ESTUDO DO EFEITO SOLVENTE SOBRE AS PROPRIEDADES GEOMÉTRICAS DA MOLÉCULA 4,4'-(DISULFANE-1,2-DIYL)BIS(5-METHYL-2H-1,3-DITHIOL-2 ONE) (APOIO CNPq)

Aluna: Jakelliny Rodrigues Silva

Orientador: Prof. Dr. Clodoaldo Valverde

Curso: Engenharia Civil

Campus: Goiânia – Flamboyant

As propriedades geométricas e elétricas das moléculas *4,4'-(disulfane-1,2-diyl)bis(5-methyl-2h-1,3-dithiol-2-one)* e *4,4-(diselanane1,2-diyl)bis(5-methyl-2H-1,3-dithiol-2-one)* foram inicialmente estudadas a partir de dezenove solventes. A fim de simular o efeito dos solventes foi utilizado o modelo contínuo polarizável por meio da teoria do funcional da densidade em conjunto com a função base B3LYP/6-311+G(d), para obter os valores dos ângulos entre os átomos, medidas de distâncias entre os átomos, desvio médio quadrático, que é uma sobreposição entre a fase gasosa (vácuo) e o solvente, distância máxima entre os átomos, orbital molecular mais alto ocupado (HOMO) e o orbital molecular mais baixo desocupado (LUMO), e o *gap* de energia, que é a diferença de energia entre os orbitais . O solvente Mistura n-MetilFormamida apresentou os melhores valores no desvio médio quadrático de 0,1623 Å (sendo, $1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$), na distância máxima com o valor de 0,2609 Å , Gap de energia de 3,8798 elétron-Volt e momento dipolo de 0,4822 em Debye (sendo, $1 \text{ D} = 3,33564 \cdot 10^{-30} \text{ C}$) na molécula *4,4'-(disulfane-1,2-diyl)bis(5-methyl-2h-1,3-dithiol-2-one)* e para molécula *4,4-(diselanane1,2-diyl)bis(5-methyl-2H-1,3-dithiol-2-one)* foram dois solventes que obtiveram maiores valores, sendo o solvente Formamida com maiores para a distância máxima de 0,2278 Å e desvio médio quadrático de 0,1413 Å e o solvente Mistura n-MetilFormamida que obteve melhores valores para o *gap* de energia de 4,0626 elétron-Volt e momento dipolo de 1,1153 em Debye. Portanto, além de observar os maiores valores de otimização em cada solvente, observou-se também que os valores de desvio médio quadrático, distância máxima, *gap* de

energia e momento dipolo aumentam proporcionalmente com a constante dielétrica de cada solvente ($1.43 < \epsilon > 181.560$).