

## **PROPRIEDADES VIBRACIONAIS EXPERIMENTAIS E TEÓRICAS DE MOLÉCULAS ORGÂNICAS.**

DAVID WESLEY ALVES DA SILVA, FRANCISCO ROMÁRIO LEITE BELÉM, DINIZ MACIEL DE SENA JUNIOR

O avanço da tecnologia levou ao desenvolvimento de máquinas e métodos capazes de simular as propriedades de vários sistemas. No caso das moléculas, propriedades estruturais e vibracionais podem ser calculadas com relativa facilidade. Para correlacionar os resultados teóricos com aqueles obtidos experimentalmente, métodos específicos devem ser aplicados. No caso dos espectros vibracionais, um fator de escala é calculado com este objetivo. No Laboratório de Bioinformática Avançada foi desenvolvido um programa na linguagem FORTRAN (FORmula TRANslation system), com a finalidade de calcular os fatores de escala para espectros vibracionais, substituindo um método manual, que utiliza planilhas de cálculo, por um procedimento automático, mais rápido, e menos susceptível a erro. Este projeto tem o objetivo de obter os dados teóricos e experimentais que servirão de entrada para os cálculos dos fatores de escala e validação do programa. As substâncias D-fenilalanina, L-fenilalanina, D-valina, ácido D-glutâmico e Timol, tiveram sua estrutura molecular otimizada, e posteriormente seu espectro vibracional no infravermelho calculado, utilizando o pacote G.A.M.E.S.S (General Atomic and Molecular Electronic Structure System) com o nível de teoria MP2 (teoria da perturbação de segunda ordem de Møller-Plesset) e base 6-31-G(d,p). Os espectros vibracionais no infravermelho foram obtidos no espectrômetro FT-IR Cary 600, em pastilha de KBr. Os valores das frequências vibracionais assim obtidas foram organizados em um arquivo texto para servir de entrada para o programa. O fator de escala médio obtido para as substâncias estudadas foi de 0,9871 com um erro médio de 15,72/cm. Para o nível de teoria utilizado, a literatura prevê um fator de escala médio de 0,9370, representando uma diferença de 5% do calculado. Isto, juntamente com o baixo erro observado, demonstra a eficiência e precisão do programa desenvolvido.

**PALAVRAS-CHAVE:** ESPECTROS VIBRACIONAIS, OTIMIZAÇÃO, FORTRAN, FATOR DE ESCALA.

**ÁREA TEMÁTICA:** QUÍMICA BIOLÓGICA

**FORMA DE APRESENTAÇÃO:** ORAL