ESTUDOS TEÓRICOS DO COMPOSTO GM3 ATRAVÉS DO MÉTODO DA TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE

OTACILIO VILAR SILVESTRE DO NASCIMENTO, HERCULES DE SOUZA SANTANA, FRANCISCO HERMESSON GONÇALVES
ARAÚJO DO NASCIMENTO, CARLOS EMIDIO SAMPAIO NOGUEIRA

Para o âmbito da física computacional, destacando a área espectroscopia vibracional para este trabalho, apresentamos o estudo computacional realizado pelo método da Teoria do Funcional da Densidade (DFT) do composto (4E)-4-(4-metoxibenzilidenoamino)-1,2-dihidro-2,3-dimetil-1-fenilpirazol-5-ona, designado neste trabalho como GM3. O composto GM3 é uma Base de Schiff derivada de 4-aminoantipirina. Os compostos de bases de Schiff possuem ampla variedade de aplicações biológicas e farmacológicas. Neste trabalho temos como foco de estudo as propriedades vibracionais, bem como dos orbitais de fronteira da substância GM3 através do método DFT utilizando a base 6-31G (d,p). A estrutura molecular inicial foi otimizada e a atividade Raman calculada utilizando-se o Software Gaussian 03. Os modos vibracionais obtidos computacionalmente foram analisados através da Distribuição da Energia Potencial (PED) utilizando-se o software VEDA e os resultados computacionais foram comparados aos estudos espectroscópicos realizados através das técnicas de Espectroscopia Raman e Infravermelha. Além da atribuição dos modos vibracionais foi calculado o gap de energia entre o orbital molecular ocupado mais alto (HOMO) e o orbital molecular não ocupado mais baixo (LUMO), no intuito de que com os dados da pesquisa em mãos tenhamos bem detalhados estes orbitais que foram analisados afim de propor possíveis sítios de reação.

PALAVRAS-CHAVE: FÍSICA; ESPECTROSCOPIA; GM3, TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE; DFT

ÁREA TEMÁTICA: FÍSICA

FORMA DE APRESENTAÇÃO: PÔSTER