

ESTUDOS TEÓRICOS DA FOTOISOMERIZAÇÃO DE BUTADIENO COM SUBSTITUENTES CHO E Cl

Laís Petra Machado (IC); Márcio Soares Pereira (PQ)

DEQUIM/ICE/UFRRJ, msoares@ufrj.br

Palavras-chave: Fotoisomerização, butadieno, pentadienal

INTRODUÇÃO

A interação entre a luz e a matéria está presente nos mais importantes processos da natureza. Fótons são utilizados por sistemas naturais como doadores de energia ou como elementos de informação. A isomerização Z-E da ligação C=C é induzida pela energia proveniente dos fótons¹. Este é um processo fotoquímico amplamente explorado e forma a etapa fundamental em muitos processos fotobiológicos como, por exemplo, visão, bomba de íons induzida pela luz e fototaxia.²

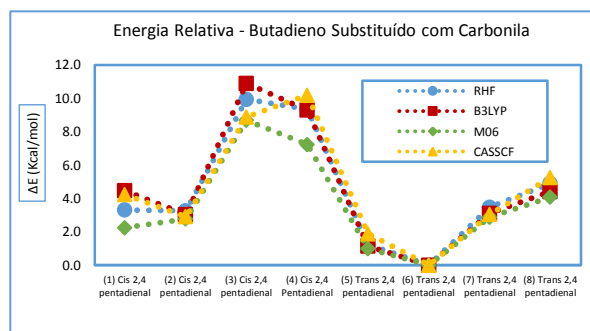
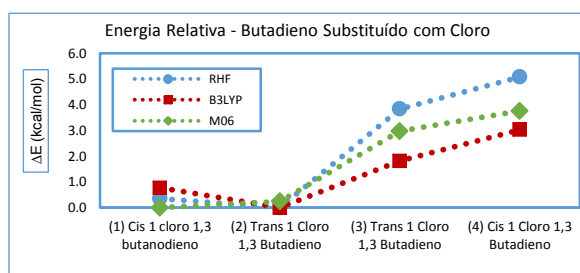
O projeto tem como objetivo obter pontos relevantes da superfície da energia potencial para as moléculas de butadieno substituído com grupo Cl e moléculas de butadieno substituídas com carbonila. Esta descrição da superfície pode gerar um modelo para a compreensão da influência dos grupos na geometria e no processo de fotoisomerização.

MÉTODOS

Foram estudadas as moléculas de cloro-butadieno e pentadienal. Como ponto de partida para as investigações no estado excitado, foram mapeadas as configurações das moléculas que correspondem a mínimos na superfície de energia no estado fundamental, através de quatro metodologias: o método Hartree-Fock (HF); funcional da densidade (DFT), com dois funcionais (B3LYP e M06) e o método CASSCF. Todos os cálculos foram realizados com o programa GAMESS. Os Cálculos DFT e HF foram realizados com a base 6-31G**, o os cálculos de CASSCF foram realizados com a base ACCD.

RESULTADOS

Os gráficos a seguir apresentam a energia relativa para os conformêros de cadeia aberta dos butadienos substituídos.



É possível observar que, tanto para o Cl-butadieno quanto para o pentadienal, o conformêro que corresponde ao mínimo global é um isômero E (trans). Por outro lado as estruturas de maior energia correspondem a isômeros Z (cis).

CONCLUSÃO

Neste trabalho foram mapeados os mínimos na superfície de energia potencial para o butadieno substituído com CHO e Cl no estado fundamental. Estão sendo concluídos os cálculos dos estados de transição conectando os diferentes conformêros e estão sendo investigadas as estruturas no estado excitado.

AGRADECIMENTOS: CNPQ

Semeraro, M.; Silvi, S.; Credi, A. AIP Conf. Proc. 2007, 963, 603–606

Dugave, C.; Demange, L. Chem. Rev. 2003, 103, 2475–2532.