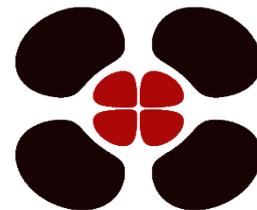




ESTRUTURA DA MATÉRIA E FÍSICA COMPUTACIONAL



Seminário de Grupo

Sondagem de Capsaicina em diferentes funcionais no método DFT

Duillio Luis Lopes de Oliveira

Departamento de Física - UNIR

Resumo: Neste trabalho submetemos a molécula de capsaicina a diversos cálculos de química computacional utilizando o método DFT. O objetivo é correlacionar as informações obtidas nas rotinas computacionais e identificar a melhor metodologia para obtenção da conformação, para obtenção de espectros Raman. A molécula de capsaicina é composta por um anel aromático, um grupo fenol e uma ligação amida. Os conjuntos de bases utilizados foram 6311+G**, LanL2DZ, cc PVDZ, juntamente com os funcionais B3LYP e CAM-B3LYP. Nossos resultados indicam que os conjuntos de bases LanL2DZ e ccPVDZ são mais eficientes em velocidade, mantendo ainda resultados satisfatórios, porém o conjunto de bases 6311+G** apresentou melhores valores de EPM, e menores valores de energia de formação. Continuamos com uma análise conformacional da capsaicina com a base LanL2DZ com o funcional B3LYP, o ângulo de diedro escolhido está na parte central da molécula sendo os átomos O1, C11, N4 e H36. Foram dados 36 passos de 10°. Obtivemos resultados consistentes com o trabalho do SIUEM (2017). Verificamos duas posições favoráveis à menor energia, sendo o mínimo global a posição da imagem 1, cujo valor energético é -26733,9 eV, e o mínimo local uma posição alongada com valor energético de -26733,7 eV.

21 de fevereiro de 2025, sexta-feira, 14 h

Miniauditório do Campus de Ji-Paraná - UNIR