

**Universidade de São Paulo
IQSC-USP**

**Química Computacional:
Pentano**

André Luis Bonfim Bathista e Silva

Luciano Carvalho Cogo

Marcelle Beltrão Bedouch

Pentano

O Pentano é um hidrocarboneto formado por 17 átomos, sendo sua composição 5 átomos de Carbono (83.24%) e 12 átomos de Hidrogênio (16.76%). Sua fórmula geral é C_nH_{n+2} e peso molecular de 72.149 mol/g. Sua estrutura é linear encontrado na forma de gás.

Propriedades Físico-Químicas

Molar Refractivity	= $25.21 \pm 0.3 \text{ cm}^3$
Molar Volume	= $111.0 \pm 3.0 \text{ cm}^3$
Parachor	= $231.0 \pm 4.0 \text{ cm}^3$
Index of Refraction	= 1.371 ± 0.02
Surface Tension	= $18.7 \pm 3.0 \text{ dyne/cm}$
Density	= $0.649 \pm 0.06 \text{ g/cm}^3$
Dielectric Constant	= 1.83 ± 0.1
Polarizability	= $9.99 \pm 0.5 \cdot 10^{-24} \text{ cm}^3$

Calculado pelo ChemSketch 4.0

Mecânica Molecular

A Mecânica Molecular é um método de Química Computacional que utiliza-se das Equações de Newton para solucionar problemas para cada tipo de Campo de Força.

Para o Pentano, calculamos a energia do estado fundamental e os Campos de Forças escolhidos foram os seguintes:

$$E_T = E_r + E_\theta + E_\delta + E_E$$

Comparações entre os Softwares

Estação para o cálculo de conformação foi Pentium III – 600MHz – 128 MB. O tempo de processamento foi de 50”.

Energia de Otimização de Geometria

Software	Energia (eV)	Gradiente (10^{-3})
MM ⁺	2.821	8.753
AMBER	1.257	9.288
OPLS	0.2201	5.949

Semi-empirical Single Point

A single point calculation gives the static properties of a molecule. The properties include potential energy, derivatives of the potential energy, electrostatic potential, molecular orbital energies, and the coefficients of molecular orbitals for ground or excited states.

Software	Energia (Kcal)	Gradiente (Kcal.A/mol)
PM3	-1514.371	0.007550

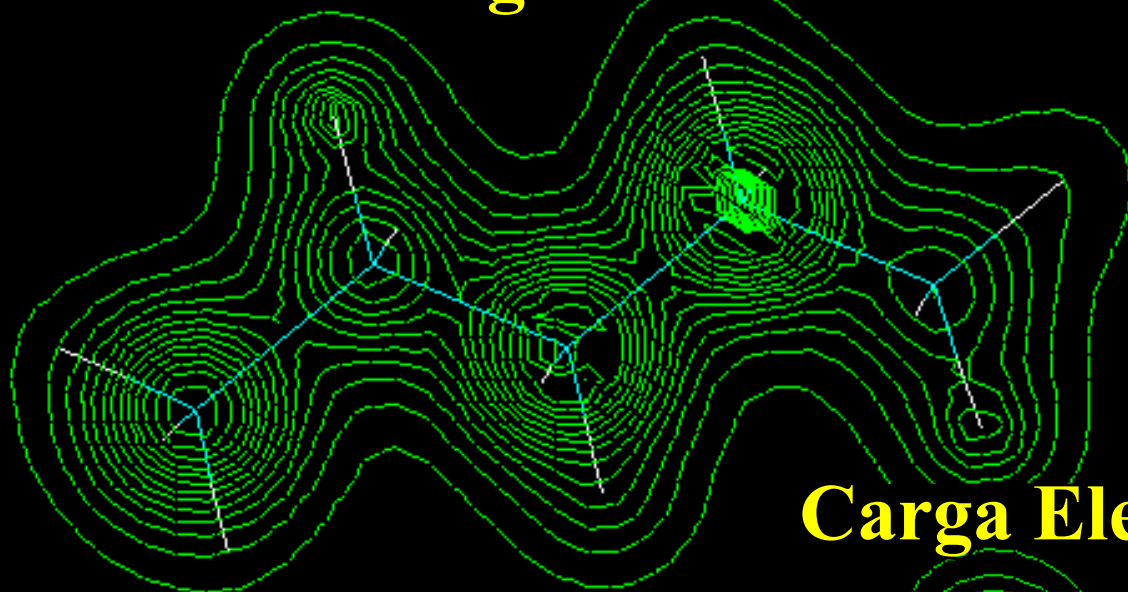
Simmetry = C2V

Semi-empirical

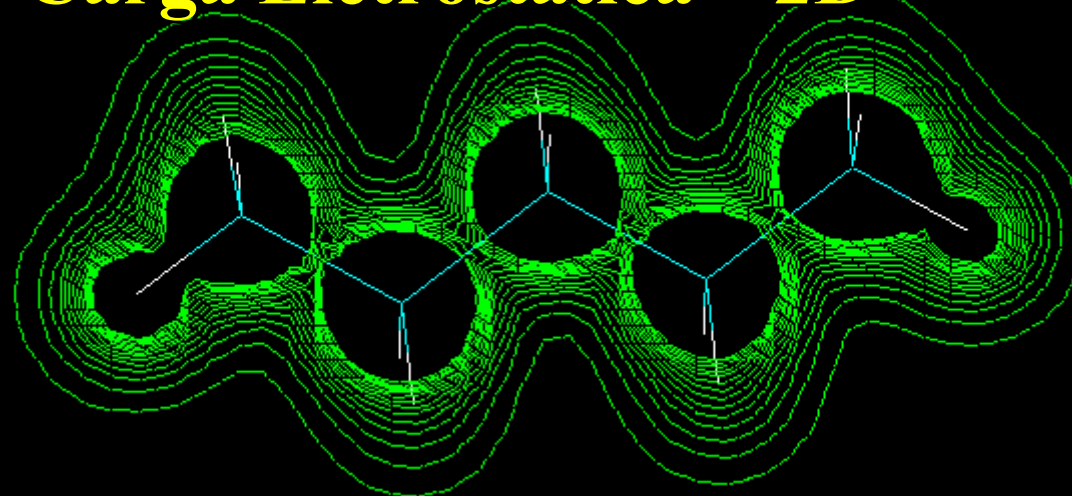
Software PM3	Energia
Energia total	-17957.46289
Energia Ligação	-1514.37085
Calor de Formação	-34.69686127
Energia Nuclear	58720.24219
Energia eletrônica	-7667.70313
Dipólo	0.002163

Propriedades Moleculares I

Densidade carga total – 2D

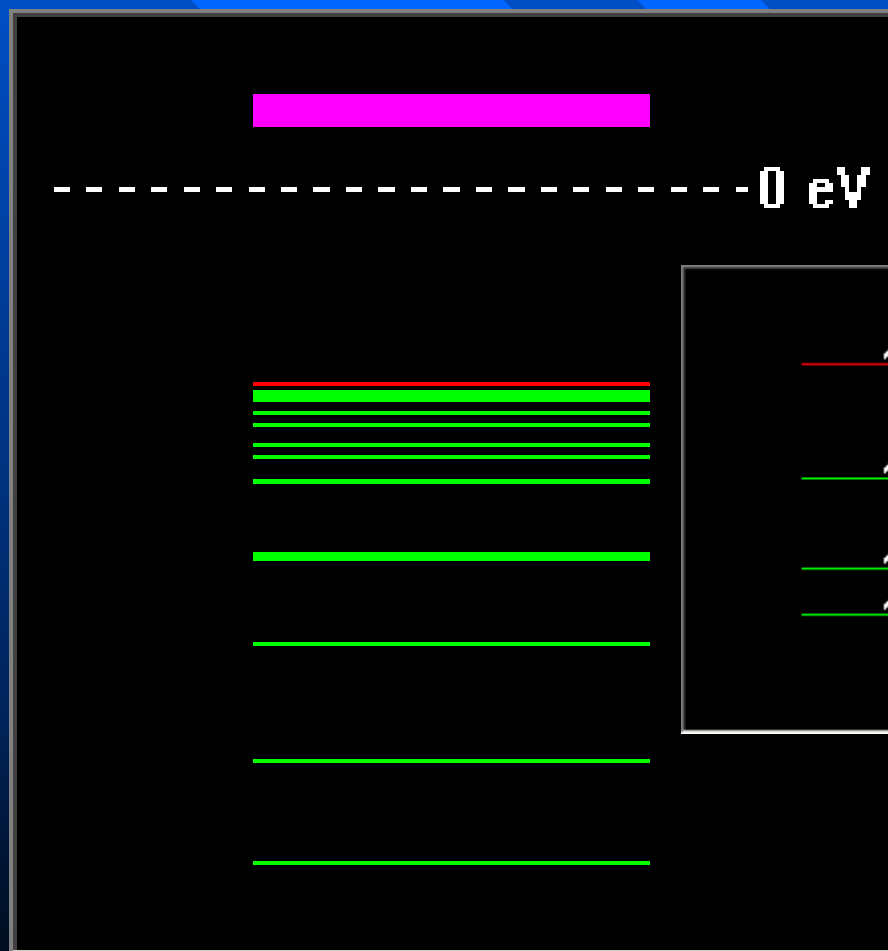


Carga Eletrostática – 2D

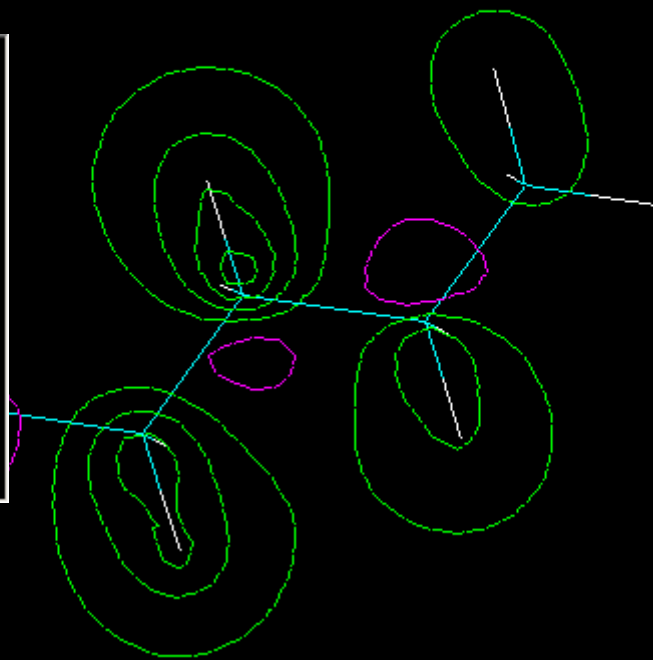
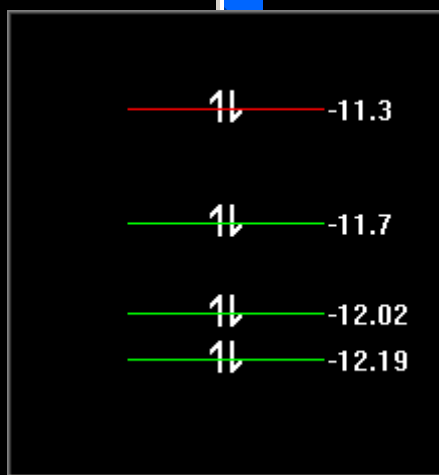


Propriedades Moleculares II

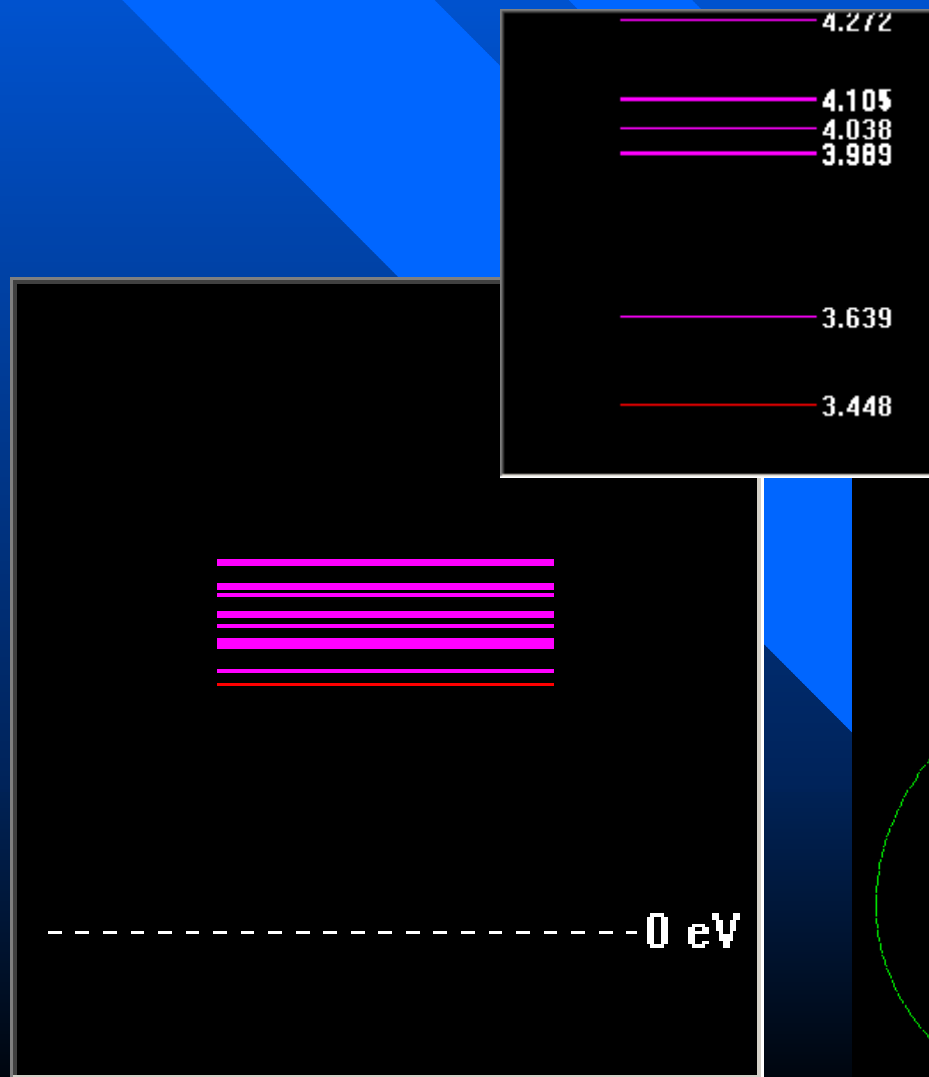
Orbitais



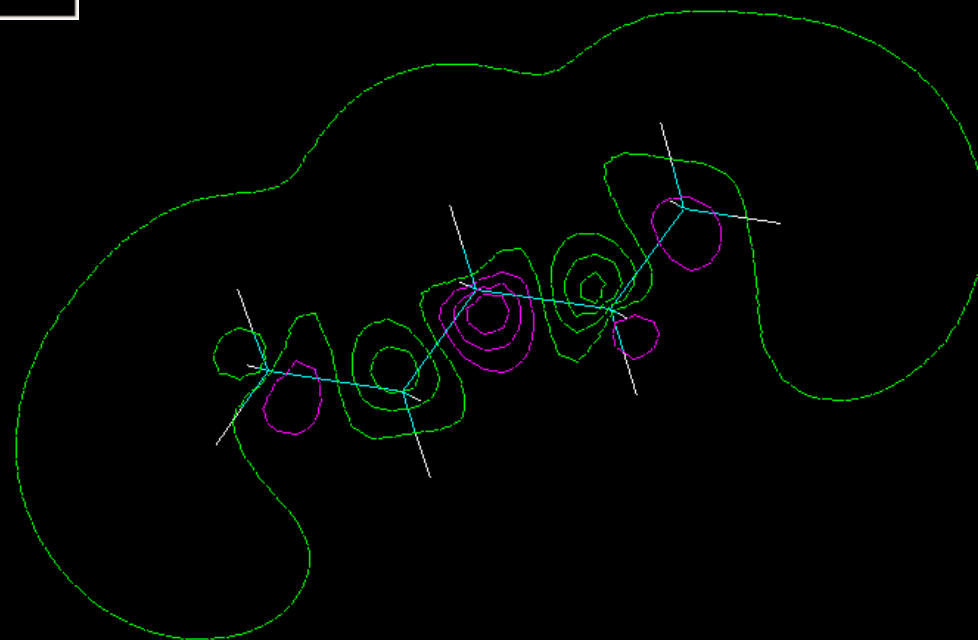
HOMO = -11.29612 eV
- 3B1



Propriedades Moleculares III

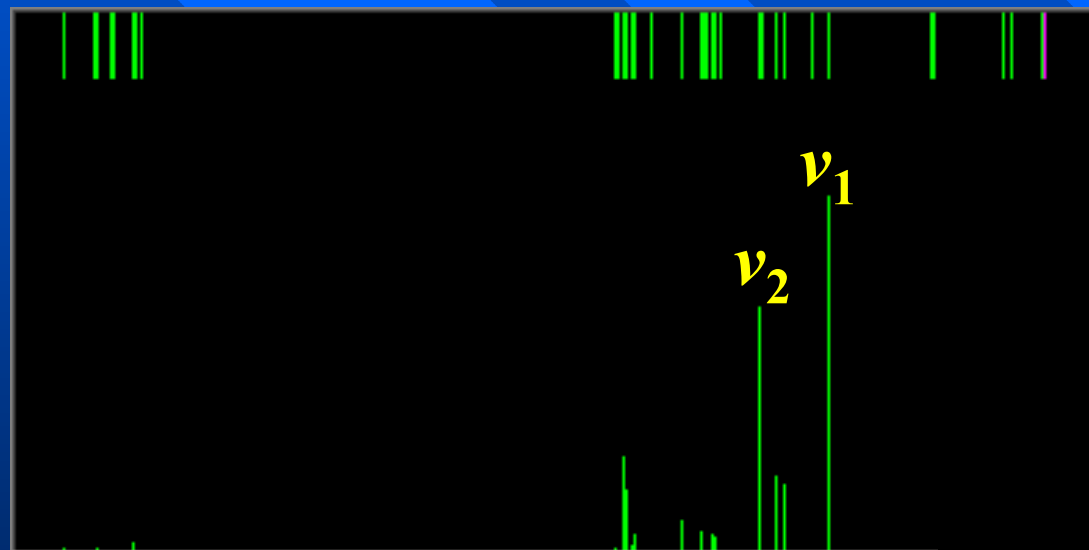


LUMO = 3.44829 eV – 7A1



Propriedades Moleculares IV

Espectro Vibracional

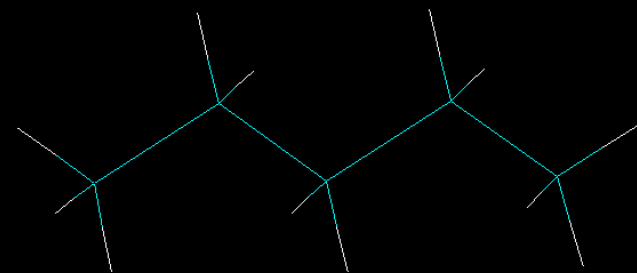


$\nu_1 = 762.95 \text{ cm}^{-1}$
Torção – 3B1

$\nu_2 = 985.15 \text{ cm}^{-1}$
Angular – 2B2

46 modos de vibração

Pentano



Propriedades Moleculares V

Dimensões do Pentano

Área Superficial (Approx)	307.29 A ²
Área Superficial (Grid)	267.57 A ²
Volume	377.40 A ²
Energia de Hidratação	3.16 kcal/mol

Propriedades Moleculares VI

Ordem de Ligação

