



Sessão de Química  
Dia 03/07/13 – 13h30 às 18h30  
Unila-PTI - Bloco 03 – Espaço 03 – Sala 02

# Aplicación de las energías moleculares a la predicción de propiedades fisicoquímicas de contaminantes ambientales y sus productos de degradación.

**Francisco Javier Arias Ortiz\***

Universidade Federal da Integração Latino-Americana  
Engenharia de Energías Renováveis  
E-mail: francisco.ortiz@unila.edu.br

**Norma Caballero**

Universidade Federal da Integração Latino-Americana  
Instituto Latino-Americano de Ciências da Vida e da Natureza  
E-mail: norma.caballero@unila.edu.br

## RESUMO

El trabajo realizado se ha basado en los cálculos computacionales de los compuestos denominados "PIRETROIDES", que son derivados de las Piretrinas, estos son un grupo de pesticidas artificiales desarrollados para controlar las poblaciones de insectos, de uso doméstico, agrícola, salud, y en etapas de preparación de alimentos. Los Piretroides se encuentran entre los pesticidas de segunda generación (Orgánicos sintéticos). Para el estudio de estas moléculas se han empleado métodos computacionales a través de varios programas (HYPERCHEM, CHEMSKETCH, Y GAUSSIAN), con estos programas se ha hecho un modelado de las estructuras moleculares a través de cálculos con métodos de Mecánica Cuántica (Que se basa en la ecuación de Schrödinger para describir a una molécula con un tratamiento directo de la estructura electrónica y que se sub-divide a su vez en dos clases, según el tratamiento realizado en métodos Ab-initio y Semi-empíricos), y la Mecánica Molecular (Que aplica las leyes de la física clásica al núcleo molecular). Se ha utilizado la fórmula desarrollada de los Piretroides como una geometría de partida para realizar los cálculos, con estas moléculas se ha desarrollado una pre-optimización con el programa Hyperchem con los métodos Semi-empíricos AM1 y PM3, y con el Método de Mecánica Molecular MM+. Con la aplicación de estos métodos se realizaron cálculos de las contribuciones a la energía Potencial de las moléculas debidas a: alargamiento de enlace, deformación de ángulos de enlace, deformación fuera del plano, rotación interna alrededor de un enlace, también llamada torsión, el Cálculo de Energía en un punto, la Optimización Geométrica que consiste en la modificación sistemática de las coordenadas atómicas, dando como resultado una geometría donde las fuerzas netas en la estructura son iguales a cero, en una disposición 3D de los átomos, representa un mínimo de energía local. Y los cálculos de propiedades físicas y químicas, tales como la carga, momento dipolar, etc. Todos estos parámetros fueron calculados con los métodos Semi-empíricos y con el método de Mecánica Molecular de manera a tener un cuadro comparativo de los datos obtenidos con cada método, y así saber cuáles métodos nos dan una mejor optimización de las moléculas en estudio. Luego de hacer la pre-optimización con el programa Hyperchem, se realizaron los cálculos de manera similar en el Programa Gaussian, realizando una aproximación en la cual se empleó la teoría del funcional de la densidad (DFT). Esta teoría se ha aplicado para predecir las propiedades moleculares tales como entalpías de

---

\*bolsista de Iniciação Científica PROBIC/CNPq

formación, estructuras moleculares, frecuencias vibracionales, etc. de las moléculas de Permetrina, Resmetrina, Cipermetrina, Fenvalerato y Etofenprox usando diferentes FUNCIONALES (funciones matemáticas) y diferentes BASES (representaciones matemáticas de los orbitales moleculares), el funcional que se ha utilizado para la mayoría de los cálculos es el funcional B3LYP, ya que este demanda poco tiempo computacional al realizar los cálculos, y por lo tanto fue apropiado para realizar los cálculos con moléculas complejas como las que estamos trabajando para llegar a distinguir que combinación de parámetros da un mejor resultado en comparación a los datos experimentales que están siendo desarrollados en conjunto por una Estudiante de la Universidad Nacional de Asunción (UNA), en la Universidad de la Plata Argentina.

**Palavras-chave:** *Mecanica Cuantica: Se basa en la Ecuacion de Schrödinger.*