

UNIVERSIDADE FEDERAL DO TRIÂNGULO MINEIRO

Disciplina: Química orgânica II

Prof. Me. Richard Gabriel Freitas Guedes

Prática III

DINÂMICA MOLECULAR APLICADA À QUÍMICA ORGÂNICA: INFLUÊNCIA DO
GRUPO ABANDONADOR NA VELOCIDADE DE FORMAÇÃO DE ALCENOS

Nome: _____

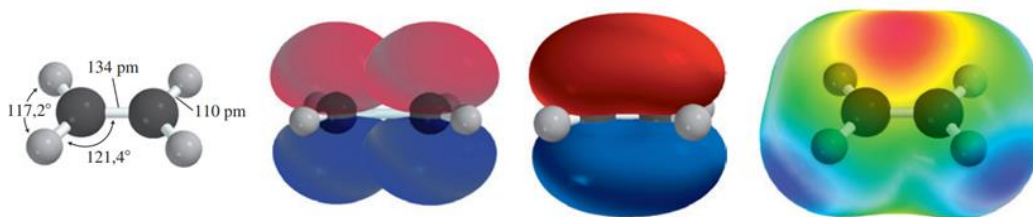
Data: ____/____/____

**Iturama-MG
2025**

1 INTRODUÇÃO

Os alcenos são hidrocarbonetos que apresentam uma ligação dupla entre dois átomos de carbono (figura 1).

Figura 1 – Representação estrutural do eteno e seus respectivos ângulos de ligação e comprimentos de ligação (a), seus orbitais p (b) e suas respectivas sobreposições formando a ligação π (c) e seu mapa de potencial eletrostático demonstrando a alta densidade de probabilidade eletrônica (vermelho) devido a ligação π (d).



Fonte: Francis A. Carey, 2016. Vol. 1.

De forma geral, a formação de um alceno envolve a eliminação de um grupo de saída (F, Cl, Br, I) pode ocorrer via unimolecular (E₁) ou bimolecular (E₂).

2 OBJETIVOS

2.1 Objetivos gerais

Realizar a dinâmica molecular do fluoreto de metila, cloreto de metila, brometo de metila e iodeto de metila, todos com uma base forte (NaOH).

2.2 Objetivos específicos

- Desenvolver habilidades tecnológicas integradas a química orgânica;
- Aprimorar a capacidade lógica por meio da linguagem de programação;
- Compreender a reação de eliminação bimolecular utilizando a otimização geométrica;
- Comparar a influência do haleto -grupo de saída- na velocidade da reação de eliminação bimolecular;
- Preparar estudantes visando a nova demanda tecnológica da indústria 4.0.

3 Metodologia

3.1 Desenvolvendo comandos básicos no terminal Linux

Inicialmente serão realizados exercícios operacionais no terminal do Linux seguindo as etapas abaixo:

1ª Etapa - Crie uma pasta e nomeie como ***pratica2*** :

`mkdir pratica2` (pressione enter)

2ª Etapa – Verifique se a pasta foi criada por meio do comando ***ls*** :

`ls`

3ª Etapa – Acesse a pasta ***pratica2*** por meio do comando ***cd*** :

`cd pratica2` (pressione enter)

4ª Etapa – Dentro do diretório ***pratica2*** crie a pasta ***fluorometano*** :

`mkdir fluoroetano` (pressione enter)

5ª Etapa – Repita a quarta etapa criando mais três pastas adicionais dentro do diretório ***pratica2***, nomeando-as como: cloroetano, bromoetano, iodoetano:

*Descreva manualmente o comando utilizado para criar a pasta ***cloroetano***:*

*Descreva manualmente o comando utilizado para criar a pasta ***bromoetano***:*

*Descreva manualmente o comando utilizado para criar a pasta ***iodoetano***:*

6ª Etapa – Delete todas as pastas criadas por meio do comando `rm -r` :

`rm -r fluoroetano cloroetano bromoetano iodoetano`

7ª Etapa – Crie todas as pastas novamente utilizando o comando mkdir direto :

mkdir fluoretano cloroetano bromoetano iodoetano

3.2 Química computacional

3.2.1 Otimização geométrica dos haletos de etila

1º) Utilizando o programa Chemcraft modele um sistema contendo fluoretano com íon hidroxila (Lembre-se de que o halogênio deve estar anti-coplanar ao hidrogênio).

Comandos básicos do chemcraft:

Ctrl + A (Abre a tabela de moléculas)

Ctrl + F (Opções de estruturas moleculares previamente modeladas)

Ctrl + B (Realiza ligações entre pares de átomos selecionados)

2º) Após modelar o sistema, acesse a aba '**coord**' no chemcraft e copie as coordenadas do sistema em formato **coord**.

Comando para copiar no Windows: Ctrl + C

3º) Após copiar as coordenadas, acesse sua pasta previamente criada no Linux 'fluoretano', e utilize os comandos abaixo:

1. nano (pressione enter)
2. copie as coordenadas do sistema 1 (Ctrl + shift + v)
3. salve o arquivo digitando 'S'
4. nomeie o arquivo como: coord

4º) Repita o processo das etapas 1, 2, 3 para os sistemas 2, 3 e 4 informados abaixo:

Sistema 2: cloroetano e íon hidroxila

Sistema 3: bromoetano e íon hidroxila

Sistema 4: iodoetano e íon hidroxila

Obs: Cada coordenada gerada para cada um dos sistemas deverá ser transferida para a pasta correspondente, por exemplo: coordenadas do cloroetano e íon hidroxila para a pasta cloroetano.

5º) Após criar todos os arquivos de entrada, acesse a pasta fluoretano, e digite o seguinte comando para realizar a otimização geométrica:

xtb coord –opt

6º) Realize a etapa cinco para os demais sistemas criados.

Questão 1 - Acesse a pasta “Prática 2” no Windows e abra cada um dos arquivos “xtbopt.log” no chemcraft e responda as perguntas abaixo com base em suas observações qualitativas de cada sistema:

	Sistema 1	Sistema 2	Sistema 3	Sistema 4
Análise	$\text{C}_2\text{H}_5\text{F} + \text{OH}^-$	$\text{C}_2\text{H}_5\text{Cl} + \text{OH}^-$	$\text{C}_2\text{H}_5\text{Br} + \text{OH}^-$	$\text{C}_2\text{H}_5\text{I} + \text{OH}^-$
Produtos formados				
O grupo de saída foi removido?				
Houve aumento ou diminuição da entropia (ΔS) no sistema?				
Qual o tipo de eliminação (E_1 ou E_2)?				
Classifique a ordem de velocidade de reação				

3.2.2 Dinâmica molecular: hidrogenação de alcenos

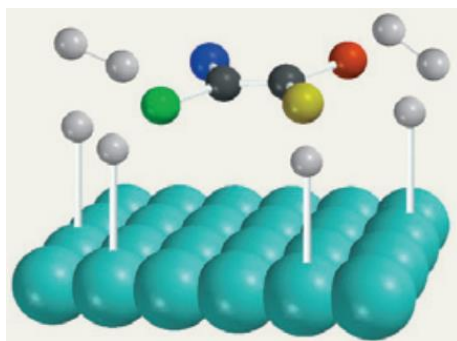
Depois de otimizar os sistemas de eliminação, agora iremos realizar uma dinâmica molecular de hidrogenação em alcenos. Para isso, nosso sistema deve conter um alceno (eteno), hidrogênio molecular (H_2) e um catalizador (Pt).

1ª Etapa: modelagem e otimização inicial do sistema de hidrogenação

1. Inicialmente, acesse o link <https://legacy.materialsproject.org/materials/mp-126/> e baixe a estrutura do catalisador, que será a platina.
2. Abre o arquivo cif no programa VESTA e exporte o arquivo como xyz, e não salve as posições atômicas.
3. O novo arquivo será aberto no programa Chemcraft, onde serão adicionados oito átomos de hidrogênio na parte superficial da superfície da platina. Copie as coordenadas atômicas e copie-as para a pasta desidrogenação/etapa1. Os comandos para executar essa tarefa são:

1. *Ctrl + v (copiar as coordenadas no word)*
2. *Acessar a pasta desidrogenação/etapa1*
3. *nano (abrir a tela do editor de texto)*
4. *Ctrl + shift + c (colar as coordenadas e salvar como 'etapa1.inp')*
5. *xtb etapa1.inp --opt (para calcular a otimização geométrica)*

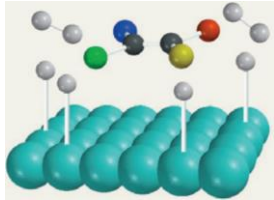
Obs: Observe, que diferentemente do livro, não adicionamos o eteno junto ao hidrogênio molecular, para garantir que primeiro o hidrogênio molecular se ligue a platina, evitando a formação de H_2 que é muito estável e não se liga diretamente ao eteno.



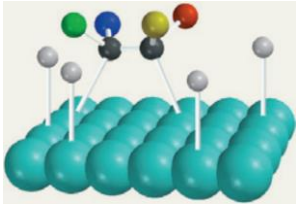
4. Visualize as etapas da otimização no programa chemcraft abrindo o arquivo 'xtbopt.log'.

2ª Etapa: Por meio das coordenadas otimizadas da etapa 1, acrescente uma molécula de eteno e faça o mesmo procedimento da primeira etapa na pasta etapa2.

Questão 2 – Analise o quadro abaixo, compare com o modelo do livro e complete-o a partir das observações virtuais simuladas computacionalmente:

Fonte	Definição	Modelo
Carey, Francis A. Química Orgânica 7ª Edição, Vol 1, p. 255, 2011.	1º) As moléculas de hidrogênio reagem com átomos de metal na superfície do catalisador. A ligação σ hidrogênio-hidrogênio relativamente forte é quebrada e substituída por duas ligações fracas metal-hidrogênio.	
	_____	(Desenho)

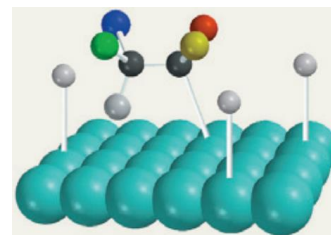
Experimento	_____	
Computacional	_____	

Carey, Francis A. Química Orgânica 7ª Edição, Vol 1, p. 255, 2011.	2º) O alceno reage com o catalisador metálico. A componente σ da ligação dupla entre os dois carbonos é substituída por duas ligações σ relativamente fracas carbono-metal.	
	_____	(Desenho)

Experimento	_____	
Computacional	_____	

Carey, Francis A.
Química Orgânica
7ª Edição, Vol 1, p.
255, 2011.

3º) Um átomo de hidrogênio é transferido da superfície do catalisador para um dos carbonos da ligação dupla.

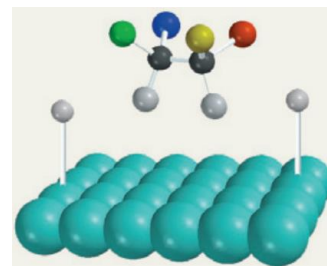


(Desenho)

Experimento
computacional

Carey, Francis A.
Química Orgânica
7ª Edição, Vol 1, p.
255, 2011.

O segundo átomo de hidrogênio é transferido, formando o alceno. Os locais da superfície do catalisador nos quais a reação ocorreu ficam livres para aceitar moléculas adicionais de hidrogênio e alceno.



(Desenho)

Experimento
computacional

(Desenho)

The diagram illustrates a computational experiment setup. It features a series of horizontal lines arranged in a sequence, representing data flow or processing steps. The lines are organized into two main groups: a top group with two thick black lines, and a bottom group with four thin grey lines. The text 'Experimento computacional' is positioned to the left of the lines, and '(Desenho)' is positioned to the right.

(Desenho)

The diagram illustrates a computational experiment setup. It consists of a sequence of steps represented by horizontal lines. The first line is solid black. The second line is solid black. The third line is dashed black. The fourth line is solid black. The fifth line is dashed black. The sixth line is solid black. The seventh line is dashed black. The eighth line is solid black. The ninth line is dashed black. The tenth line is solid black. The text 'Experimento computacional' is positioned to the left of the lines. The text '(Desenho)' is positioned to the right of the lines.

3ª Etapa: dinâmica molecular do alceno formado

1º) Na pasta 'pratica2' crie uma pasta e nomeie como 'dm'.

2º) Copie as coordenadas da última otimização geométrica realizada na etapa anterior.

3º) Transfira essas coordenadas na pasta 'dm', abrindo o editor de texto nano e salve como dm.inp:

nano

dm.in

xtb dm.in - -input dm.in - -md crase

\$coord

0.000000000000047	-0.000000000000009	-0.000000000000008	Pt
0.000000000000030	0.000000000000002	7.45147249543279	Pt
-0.000000000000053	7.45147249543292	0.000000000000030	Pt
-0.000000000000132	7.45147249543164	7.45147249543264	Pt
7.45147249543349	0.000000000000055	-0.000000000000017	Pt
7.45147249543300	0.000000000000042	7.45147249543351	Pt
7.45147249543323	7.45147249543370	0.000000000000004	Pt
7.45147249543232	7.45147249543451	7.45147249543262	Pt
0.000000000000019	3.72573624771639	3.72573624771633	Pt
7.45147249543298	3.72573624771856	3.72573624771739	Pt
3.72573624771735	0.000000000000104	3.72573624771607	Pt
3.72573624771646	7.45147249543366	3.72573624771622	Pt
3.72573624771703	3.72573624771682	-0.000000000000019	Pt
3.72573624771667	3.72573624771707	7.45147249543332	Pt
-1.56108354351426	9.59867999942361	11.55955361904950	H
-3.54345512744829	-0.35345790159425	6.64225898715956	H
-0.49758325056036	1.02082544935659	-3.37886055221737	H
-2.79811064786703	4.11229196086828	3.53868355439068	H
-0.89158463018230	1.24841043706104	-4.94905431813957	H
-0.99443014749153	8.80434813524744	10.23006921650564	H

-5.11300089584354	-0.74155792832968	6.51908803923299	H
-7.13081562160661	3.63344104786675	3.06096865282803	C
-7.13081562159653	3.63344104786772	5.57460279434419	C
-7.13081562161095	5.37830253188679	1.97825014767106	H
-7.13081562161095	1.88857956384589	1.97825014767241	H
-7.13081562159219	5.37830253188859	6.65732129949981	H
-7.13081562159219	1.88857956384768	6.65732129950116	H

\$fix

atoms: 1-14

\$md

temp=300 # Temperatura em Kelvin (300 K = ~27°C)

time=10.0 # Tempo total de simulação (10 ps)

step=1.0 # Passo de tempo (1 fs)

dump=0.1 # Salva trajetória a cada 0.1 ps (100 frames)

nvt=true # Usa termostato NVT (Berendsen)

shake=0 # Desativa restrições de ligação (opcional)

\$end

Questão 3 – Em qual outro contexto você aplicaria um cálculo de dinâmica molecular em química orgânica?

