

A maior parte dos processos químicos ocorrem em solução e dependem de maneira significativa do solvente empregado. Os métodos usuais de Química Teórica são aplicados a moléculas ou pequenos grupos de moléculas isoladas que tendem a refletir situações próximas do estado gasoso a baixas pressões. Várias técnicas foram desenvolvidas à partir da década de 70 para incorporar o efeito de solvente em cálculos teóricos. Estas técnicas podem ser agrupadas em dois grandes grupos: os métodos que tratam as moléculas do solvente explicitamente, isto é, como entidades físicas individuais; e os métodos que consideram o solvente como um meio dielétrico contínuo caracterizado por sua constante dielétrica. Os métodos que tratam o solvente como um meio contínuo, chamado de **Campo de Reação**, produzem, por sua vez, equacionamentos matematicamente simples que podem ser acoplados facilmente aos tratamentos semi-empíricos e *ab-initio* tradicionais sem grandes dificuldades e podem ser utilizados, dentro das limitações do modelo, na descrição do efeito do solvente num grande número de problemas químicos relevantes. A principal desvantagem do modelo de Campo de Reação é a arbitrariedade da escolha do tamanho da cavidade que o soluto ocupa no meio contínuo. Os resultados são fortemente dependentes da cavidade, de modo que uma aplicação consistente do método depende de uma definição sistemática da cavidade em função da distribuição de cargas pontuais existentes no interior da cavidade. O presente projeto trata das contribuições atômicas à cavidade molecular, em função da carga líquida, para reprodução da Energia Livre de Solvatação obtida por **SCRF** (Self-Consistent Reaction Field) segundo o modelo **MST** (Miertus, Scrocco and Tomasi), em conjunto com os métodos semi-empíricos **AM1** e **MNDO-PM3**. (CESUP/FINEP, CNPq)