

127

ESTUDO TEÓRICO SOBRE A FORMAÇÃO DE COMPLEXOS EM MISTURAS DE BENZENO E DISULFETO DE CARBONO. *Fabiano S. Rodembusch, Fabiano V. Pereira, Paolo Roberto Livotto, Nádyá Pesce da Silveira* (Departamento de Físico-Química, Instituto de Química, UFRGS).

A utilização de cálculos teóricos na investigação de propriedades de sistemas moleculares formadores de ligações de van der Waals, têm crescido muito nos últimos anos. O principal objetivo tem sido o estudo das propriedades espectroscópicas, elucidativas das forças intermoleculares, as quais são responsáveis pela estabilidade destes sistemas. O objetivo deste trabalho foi investigar a natureza da interação intermolecular entre moléculas de benzeno e dissulfeto de carbono através de cálculos teóricos "ab initio". Inicialmente foram definidas diversas estruturas prováveis de serem formadas entre os dois compostos, as quais foram tratadas computacionalmente com a finalidade de obter-se as estruturas mais estáveis, através de uma minimização energética. Posteriormente foram feitos cálculos envolvendo correlação eletrônica para otimizar as energias obtidas. Para a execução dos cálculos foram utilizados os recursos computacionais do CESUP-UFRGS através do software Unichem30. Os resultados preliminares demonstraram haver uma estrutura termodinamicamente mais estável neste sistema. Os dados obtidos vêm enriquecer as informações já existentes sobre o sistema benzeno/dissulfeto de carbono, fornecendo dados mais precisos que os existentes.