Excitação eletrônica da molécula do isopreno na região do ultravioleta de vácuo

Rafael Berrelho Bernini (PG), Ana Mónica Ferreira-Rodrigues (PG), Teodorico de Castro Ramalho (PQ), Gerardo Gerson Bezerra de Souza[1]* (PQ)

*ggersonbs@yahoo.com *1 - Depto. de Físico-Química, Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, CEP 21945-170 Rio de Janeiro Caixa Postal : 68545*

Palavras Chave: *Isopreno, Espectroscopia de fotoabsorção e Perda de Energia de Elétrons.*

Introdução

O isopreno (Figura 1) é membro fundamental de uma família imensa de compostos que inclui todos os isoprenóides como a borracha, colesterol e outros esteróides, vitamina A e carotenóides, monoterpenos e terpenos superiores[1]. É muito importante em diversas áreas, tais como a química atmosférica[2] e a produção de elastômeros[3].

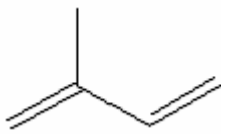

Figura 1. Isopreno

O objetivo do presente trabalhou consistiu na determinação do espectro de fotoabsorção do isopreno na região de Ultravioleta de Vácuo (UVV). O trabalho experimental foi desenvolvido no Laboratório de Impacto de Fótons e Elétrons (LIFE) do Instituto de Química da UFRJ, empregando-se um espectrômetro de alta resolução[4]. Obteve-se um espectro de perda de energia de elétrons (EPEE) na região de transições eletrônicas de valência, numa faixa de energia de 4 a 31 eV (300 – 40 nm). Usou-se cálculos *ab initio* (CIS) e de funcional de densidade (TDDFT/ PBE1PBE) como ferramentas para a interpretação dos espectros obtidos, buscando-se correlacionar as bandas observadas com transições eletrônicas.

Resultados e Discussão

No espectro eletrônico do isopreno (Figura 2) quatro picos principais foram observados: 5,72, 5,91, 6,89 e 7,47 eV, com resolução em energia da ordem de 0,07 eV. Cálculos TDDFT PBE1PBE / 6.311g++(d,p) sugerem que o primeiro pico corresponde à transição $\pi \rightarrow \pi^*$ HOMO → LUMO da molécula do isopreno.

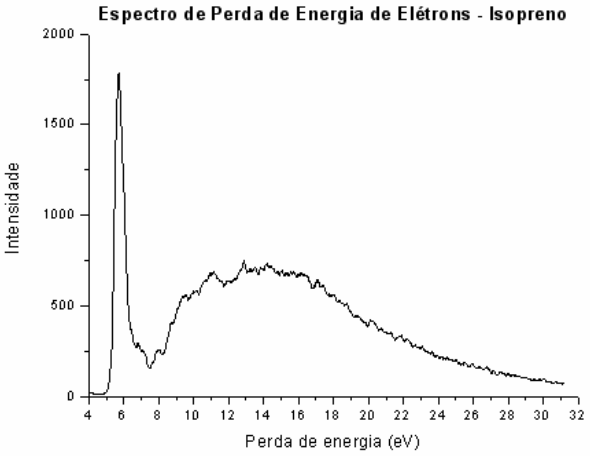

Figura 2. EPEE do Isopreno

Conclusões

Determinou-se experimentalmente e pela primeira vez pelo nosso conhecimento, o espectro de excitação eletrônica da molécula do isopreno na região do Ultravioleta de Vácuo. A técnica utilizada foi a Espectroscopia de Perda de Energia de Elétrons. O espectro eletrônico é dominado por uma banda intensa, centrada em 5,72 eV, que se atribuiu à transição $\pi \rightarrow \pi^*$ HOMO → LUMO. Outras bandas, de menor intensidade, foram observadas em 5,91, 6,89 e 7,47 eV. Outros estudos, relacionados à fragmentação iônica desta molécula, encontram-se em andamento em nosso laboratório, empregando tanto feixes de elétrons quanto a luz síncrotron.

Agradecimentos

Capes, FAPERJ, CNPq e FUJB

[1] Sharkey T.D., *Endeavour*, **1996**, *20(2)*, 74
[2] Kesselmeier J. et al, *Atmospheric Environment*, **2000**, *34*, 4063
[3] Taalman, R.D.F.M., *Toxicology*, **1996**, *113*, 242
[4] Daviel,S.; Brion, C.E.; Hitchcock, A.P. *Reviews of Scientific Instruments*, **1984**, *55(2)*, 182