

## Estudo do espectro de infravermelho do pentafluoretano (HCF-125) utilizando métodos de estrutura eletrônica.

Juracy Regis de L. Junior<sup>1</sup>(PQ)\*, Silmar A. do Monte<sup>2</sup>(PQ), Elizete Ventura<sup>2</sup>(PQ), Gessenildo P. Rodrigues<sup>1</sup>(IC), Derilânia K. A. Junqueira,<sup>1</sup>(IC), Niedja C. Martins<sup>1</sup>(IC), Elizabeth C. T. Veloso<sup>1</sup>(IC).

<sup>1</sup>Departamento de Química, Universidade Estadual da Paraíba, 58429-500, Campina Grande-PB

<sup>2</sup>Departamento de Química, Universidade Federal da Paraíba, 58036-300, João Pessoa-PB

(email: jruepb@yahoo.com.br)

DFT, ESPECTRO DE INFRAVERMELHO, HCF, EFEITO ESTUFA

### Introdução

Pentafluoretano (HCF-125) é um dos substitutos dos HCFC's usado como refrigerantes em sistemas térmicos como também em sistemas de supressão de incêndio. Não é considerado um gás danoso à camada de ozônio, pois na sua estrutura não tem cloro ou bromo, mas possui um alto potencial de aquecimento global, cerca de 3400 vezes maior que o dióxido de carbono, portanto é um gás do efeito estufa. Apesar de sua importância para química da atmosfera, pouco se conhece a respeito das propriedades eletrônicas e espectroscópicas deste sistema. Assim, o objetivo deste trabalho é estudar o espectro de infravermelho utilizando diversos métodos computacionais (HF, MP2 e DFT) e realizar a atribuição das bandas usando análise de coordenadas normais. Os resultados obtidos serão importantes para entender a dependência das posições relativas das bandas com o nível de cálculo. Estes parâmetros espectroscópicos são geralmente utilizados em modelos de simulação que tentam relacionar o efeito dos gases do chamado efeito estufa na temperatura do planeta.

### Resultados e Discussão

O HCF-125 (Figura 1) apresenta 18 modos vibracionais.

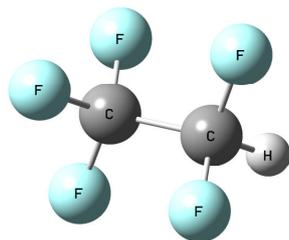


Figura 1. Estrutura do HCF-125

As cinco bandas de absorção no infravermelho com maior intensidade relativa encontram-se na região de  $1000\text{ cm}^{-1}$  a  $1200\text{ cm}^{-1}$  (Figura 2), considerada região da janela atmosférica<sup>2</sup>. Gases que absorvem nesta região são considerados importantes para o efeito estufa. A banda de absorção com a maior intensidade relativa é atribuída ao estiramento antisimétrico C–F do grupo  $\text{CF}_3$ .

33ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

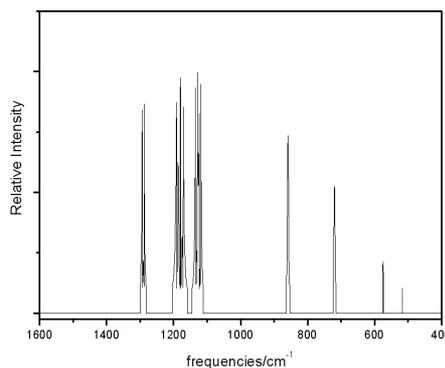


Figura 2. Espectro teórico de infravermelho do HCF-125 calculado utilizando o método B3LYP/aug-cc-pVQZ.

A partir das comparações com os demais métodos de estrutura eletrônica foi possível avaliar o efeito da correlação eletrônica na descrição dos espectros. Resultados anteriores do grupo indicavam que o método B3LYP representa uma ferramenta importante na interpretação de resultados experimentais de moléculas da família dos CFC's e HCFC's<sup>2</sup>.

### Conclusões

A metodologia teórica computacional usada neste trabalho permitiu um estudo sistemático do espectro de infravermelho para a molécula do HCF-125 utilizando vários métodos de estrutura eletrônica. A dependência das posições relativas das bandas com o nível de cálculo permitiu obter, com uma relativa confiabilidade, todas as atribuições do espectro. Assim, temos que métodos baseados no DFT podem auxiliar na interpretação de resultados experimentais de moléculas com relevância na Química da Atmosfera.

### Agradecimentos

CNPq e UEPB.

<sup>1</sup> Olliff, M.; Fischer, G., *Spectrochimica Acta*, **1992**, *48A*, 229.

<sup>2</sup> Lucena, J. R.; Sharma, A.; Reva, I. D.; Araújo, R. M. C. U.; Ventura, E.; do Monte, S. A.; Braga, C. F.; Ramos, M. N.; Fausto, *Journal of Physical Chemistry. A*, **2008**, *112*, 11641.