

# Superfícies ELF para os estados eletronicamente excitados do SO<sub>2</sub>

\*Claudimeire G. Crispim<sup>1</sup> (IC), Nilson T. Filho<sup>2</sup> (PG), Anselmo E. de Oliveira<sup>1</sup> (PQ)

\*claudimeire@msn.com

<sup>1</sup> Instituto de Química - Universidade Federal de Goiás – Goiânia (GO) - Brasil

<sup>2</sup> Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Tocantins – Tocantins (TO) - Brasil

Palavras Chave: dióxido de enxofre, estados excitados, ELF.

## Introdução

Estudos das propriedades de moléculas em estados eletronicamente excitados são de grande importância na química quântica. Compreender esses estados é necessário para entender os vários processos fotofísicos e fotoquímicos. Como SO<sub>2</sub> é apenas um dos vários poluentes atmosféricos, análises espectrais do ar contêm picos correspondentes aos diferentes gases encontrados. Desse modo, conhecer as posições energéticas dos estados eletronicamente excitados e dos níveis vibracionais leva a um aumento da importância no estudo dos estados energéticos dessas moléculas.

O método SAC/SAC-CI é um método computacionalmente eficiente e exato para o cálculo dos estados fundamental e excitado de moléculas. As funções de onda resultantes desses cálculos foram usadas no presente trabalho para o cálculo de superfícies ELF<sup>1</sup> (*electron localization function*), com o objetivo de visualizar a localização dos elétrons; compreender a natureza da interação entre os átomos; e como esses contribuem para as propriedades da molécula de SO<sub>2</sub>.

## Resultados e Discussão

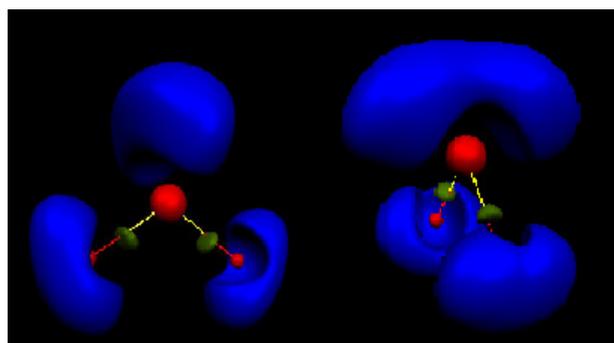
Cálculos SAC/SAC-CI/6-311++G\*\* foram realizados para o estado fundamental,  $\bar{X}^1A_1$ , e o estado eletronicamente excitado singlete  $1^1A_2$ . Os resultados teóricos, juntamente com dados estruturais experimentais constam da **Tabela 1**, com uma boa concordância entre os dados teóricos e experimentais.

**Tabela 1.** Parâmetros estruturais para o estado fundamental e o primeiro estado excitado singlete.

	$r_{S-O}/\text{Å}$	$\theta_{O-S-O}^\circ$		
$\bar{X}^1A_1$				
SAC/6-311+G*	1,439	119,5		
Experimental	1,432	119,5		
$1^1A_2$			$E^{\text{vert}}/\text{eV}$	$E^{\text{adiab}}/\text{eV}$
SAC-CI/6-311+G*	1,53	93,0	4,76	3,54
Experimental	1,53	99,0		3,463
				3,95

A superfície ELF para o estado fundamental, lado esquerdo da **Figura 1**, localiza os elétrons internos não ligantes em cada átomo, em vermelho; os elétrons que participam da ligação química, em

verde (atratores dissinápticos); e os pares de elétrons não ligantes dos oxigênios e do enxofre, em azul (bacia monossináptica).



**Figura 1.** Superfícies ELF para o SO<sub>2</sub>: estado fundamental à esquerda (SAC/6-311+G\*) e  $1^1A_2$  à direita (SAC-CI/6-311+G\*).

O estado  $1^1A_2$  ( $5b_2 \rightarrow 3b_1$ ), que se encontra a 3,463 eV em relação ao estado fundamental, **Tabela 1**, apresenta um aumento no comprimento da ligação S-O e uma diminuição no ângulo O-S-O. Na superfície ELF para esse estado excitado, lado direito da **Figura 1**, é possível verificar um maior volume das bacias monossinápticas dos átomos de enxofre e oxigênio (em azul), que correspondem aos elétrons não ligantes. Os deslocamentos dos elétrons para essas regiões resultam em duas mudanças na geometria molecular: um aumento da ligação química, como resultado da diminuição da densidade eletrônica entre os núcleos; e uma diminuição no valor da coordenada interna referente ao ângulo O-S-O, causado pelo aumento da repulsão dos pares de elétrons não ligantes do enxofre.

## Conclusões

A utilização de superfícies ELF para interpretar os estados eletronicamente excitados constitui uma ferramenta computacional eficiente, que possibilita a visualização das mudanças nas geometrias moleculares resultantes dos processos de transições eletrônicas.

## Agradecimentos

CNPq e FUNAPE.

<sup>1</sup> Becke, A.D.; Edgecombe, K.E. *J. Chem. Phys.* **1990**, 92, 5397-5403.

<sup>2</sup> Zhang, Y.; Wang, M., Ma, M.; Ma, R. *J. Mol. Struct.* **2008**, 859, 7-10.