



E453

DESENVOLVIMENTO DE FLUXOS DE CARGAS E FLUXOS DE DIPOLOS PARA INTENSIDADES VIBRACIONAIS DA REGIÃO DO INFRAVERMELHO

Sérgio Henrique Dias Marques Faria (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Roy Edward Bruns (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

Durante mais do que trinta anos nosso grupo de pesquisa determinou tensores polares atômicos para quase todas as moléculas para as quais as intensidades no infravermelho de bandas fundamentais foram medidas. Estes tensores foram usados para formar um banco de dados de parâmetros atômicos invariantes às transformações de similaridade. Nesse projeto, o cálculo de cargas, dipolos atômicos, fluxos de carga e fluxos de dipolos das moléculas NH_3 , NF_3 , PH_3 e PF_3 foi utilizado para analisar a importância do par isolado dos átomos do grupo V A nas intensidades das bandas no infravermelho. Os cálculos foram realizados com o programa Gaussian 98 no nível perturbação de Møller-Plesset de 2ª ordem (MP2) com a função de base 6-311++G (3d,3p). Os resultados mostraram que fluxos de carga são mais importantes para as coordenadas normais de estiramento do que para as de deformação, exceto para o NH_3 . Para todas as moléculas, os fluxos de dipolo atômico são maiores para as coordenadas normais de estiramento do que para as de deformação. Fluxos de carga são mais importantes do que fluxos de dipolos para as intensidades de deformação do NH_3 . Os resultados indicam que as contribuições de carga, se não são predominantes, são importantes na determinação de todas as intensidades.

Par isolado - Fluxo de cargas - Fluxo de dipolos