



UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS  
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

**AGLOMERADOS DE MOLÉCULAS ATMOSFÉRICAS – EFEITOS DA FORMAÇÃO DE  
HIDROGÊNIO NAS PROPRIEDADES ELETRÔNICAS**

Orientador: Prof. Dr. Puspitapallab Chaudhuri  
Bolsista: Emerson de Souza Gonçalves

---

Assinatura do Orientador

---

Assinatura do Bolsista

07/2013 Manaus – AM



UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS  
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

**AGLOMERADOS DE MOLÉCULAS ATMOSFÉRICAS – EFEITOS DA FORMAÇÃO DE  
HIDROGÊNIO NAS PROPRIEDADES ELETRÔNICAS**

Relatório final científico  
detalhado FAPEAM  
referente às atividades  
desenvolvidas no  
programa institucional de  
bolsas de iniciação  
científica (PIBIC)

Orientador: Prof. Dr. Puspitapallab Chaudhuri  
Orientando: Emerson de Souza Gonçalves

07/2013 Manaus – AM

## Sumário

1. RESUMO .....	04
2. INTRODUÇÃO .....	05
3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA .....	06
4. MÉTODOS UTILIZADOS .....	08
5. RESULTADOS E DISCUSSÕES .....	09
6. CONCLUSÕES .....	13
7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	14
8. CRONOGRAMA .....	15

## 1. Resumo

Desde o surgimento do homem na Terra, temos um único propósito: sempre evoluir. Partindo dessa premissa, a busca por novas tecnologias vem sendo amplamente observada e discutida. Contudo, é necessário que se faça uma reflexão sobre os impactos dessa evolução na vida das pessoas e no meio ambiente, ou seja, analisar os efeitos do desenvolvimento tecnológico sobre os fatores climáticos.

Atualmente, ocorrem amplas discussões sobre o aumento da temperatura no planeta e suas drásticas consequências. Entre os principais responsáveis, os gases emitidos através das atividades antrópicas se destacam, tais como o metano, o gás carbônico, os clorofluorocarbonos (CFCs) e os hidrofluorocarbonos (HFCs). Na linha das pesquisas do aquecimento global, o aumento da industrialização e as atividades relacionadas à agricultura são consideradas principais responsáveis pelo aumento da concentração desses gases de efeito estufa na atmosfera e o eventual aumento de sua temperatura.

O Protocolo de Montreal lista os principais gases de efeito estufa que são liberados à atmosfera, tais como os clorofluorocarbonos (CFC's), que são gases produzidos industrialmente e utilizados em ar condicionados, refrigeradores e aerossóis. Pesquisas com as moléculas de CFCs mostraram que elas não se dissolvem na baixa atmosfera, deslocando-se para a alta atmosfera onde interagem com o ozônio, destruindo-o e, contribuindo para o aumento do buraco na camada de ozônio e sua concentração cada vez maior, contribui para o aumento da temperatura global.

Para substituir os CFC's, foram sintetizados pela indústria, os hidrofluorocarbonos (HFC), porém, é um dos gases de efeito estufa, sendo que seu uso deve ser eliminado segundo o Protocolo de Quioto.

Tratando exclusivamente do fenômeno do aquecimento global, devemos analisá-lo do ponto de vista macroscópico e microscópico. O primeiro envolve as observações experimentais e experiências cotidianas, a partir qual podemos definir o que é aquecimento global, quais são suas causas e suas consequências, e o segundo envolve a atuação de grande número de moléculas na absorção e emissão da radiação, no nível molecular. Nosso projeto vem justamente tratar deste segundo caso, onde fazemos uma análise microscópica dessas moléculas que causam o efeito estufa.

## 2. Introdução

Nas últimas décadas, mudança do clima no mundo por causa do fenômeno do aquecimento global e da prostração da camada de ozônio, sem dúvida, está levantando um desafio sério à comunidade científica, bem como à sociedade humana em geral. O equilíbrio da temperatura na atmosfera da Terra é mantido por uma absorção e por uma emissão balanceadas de toda a radiação eletromagnética que alcança a superfície da terra.

Como um subproduto do crescimento industrial e econômico rápido de diversos países, a concentração dos gases de efeito estufa na atmosfera está aumentando gradualmente, e, por sua vez, está gerando aumento da temperatura da superfície global. O dióxido de carbono, metano, hidrofluorcarbonos (HFC), Clorofluorcarbonos (CFC) são alguns dos gases de estufa mais conhecidos que estão sendo liberados à atmosfera da terra com volume crescente pelas atividades antropogênicas e industriais. Pesquisas com as moléculas de CFCs mostraram que elas não se dissolvem na baixa atmosfera, deslocando-se para a alta atmosfera onde interagem com o ozônio, destruindo-o e, contribuindo para o aumento do buraco na camada de ozônio e sua concentração cada vez maior, contribui para o aumento da temperatura global.

Para substituir os CFCs, foram sintetizados pela indústria, os hidrofluorcarbonos (HFC), que também são gases de efeito estufa, sendo que seu uso deve ser eliminado segundo o Protocolo de Quioto[1-4]. Tratando exclusivamente do fenômeno do aquecimento global, devemos analisá-lo tanto do ponto de vista macroscópico quanto de microscópico. O primeiro envolve as observações experimentais e experiências cotidianas, a partir do qual podemos definir o que é aquecimento global, quais são suas causas e suas consequências, e o segundo envolve estudos detalhados, no nível molecular, sobre a atuação de grande número de moléculas atmosféricas na absorção e emissão da radiação.

A este respeito, é importante conhecer as características físicas destes gases de efeito estufa a fim avaliar, cientificamente, que propriedades são mais importantes para determinar sua eficiência e como podemos minimizar a capacidade de absorção do calor destas espécies moleculares. Tendo em mente a importância social destes fatos, a respeito dos gases de efeito estufa, pretendemos fazer uma análise detalhada de algumas propriedades elétricas e espectrais de alguns destes gases que incluem os Fluorcarbonos e Clorofluorcarbonos, tais como  $\text{CH}_3\text{F}$ ,  $\text{CH}_2\text{F}_2$ ,  $\text{CHF}_3$ , , quando elas formam aglomerados com as mesmas ou com outras moléculas atmosféricas através de formação de ligação de hidrogênio, que por si só é um assunto fascinante desde o surgimento do conceito no começo do último século.

### 3. Revisão bibliográfica

Muito já foi aprendido sobre propriedades fundamentais das ligações de hidrogênio [5-14]. Entretanto, há muito que aprender, especialmente a respeito do assunto dos efeitos da ligação do hidrogênio na capacidade de absorção e emissão da radiação das moléculas atmosféricas. Embora tenham sido feitos vários trabalhos do ponto de vista da ciência atmosférica, relativamente, poucos trabalhos teóricos foram feitos, do ponto de vista da química quântica para analisar propriedades eletrônicas das moléculas de efeito estufa.

Dentre os trabalhos realizados podemos descrever os de Bera *et al* [15], que investigaram os sistemas moleculares de CF<sub>4</sub>, CHF<sub>3</sub>, CH<sub>2</sub>F<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>F, CH<sub>4</sub>, CClF<sub>3</sub>, CCl<sub>2</sub>F<sub>2</sub>, CCl<sub>3</sub>F, CCl<sub>4</sub>, dentre outros, de modo isolados, e verificaram quais características moleculares que mais contribuem para o efeito de estufa. Em outro trabalho [16] fez uma análise da absorção de IR dentro da janela atmosférica para moléculas de PFE (Perfluoroésteres), PFC, PFO (Perfluoroolefins) e outros gases, do ponto de vista do potencial de aquecimento global (GWP) e eficiência radiativa, mostrando que as moléculas de PFE exibem grande absorção de IR dentro da janela atmosférica; Alkorta e Maluendes [17] investigaram a estrutura molecular e as energias de interação entre aglomerados das moléculas de CH<sub>3</sub>F, CH<sub>2</sub>F<sub>2</sub> e CHF<sub>3</sub> com molécula de H<sub>2</sub>O e verificaram que a inclusão de moléculas de Flúor resulta em um sistemático aumento da energia das ligações de hidrogênio em 1 kcal/mol, bem como, aumento, em 0,1Å nos comprimentos das referidas ligações.

Recentemente, Medeiros e Chaudhuri [18], num trabalho de Mestrado, estudo o processo de microssolvatação de CFCs e HFCs com moléculas de água e metanol e verificaram que a microssolvatação com moléculas de água não tem efeito significativo na capacidade de absorção da radiação infravermelho. Porém as moléculas de HFCs absorvem um valor maior da intensidade de infravermelho quando estão formando um aglomerado com moléculas de metanol do que quando as moléculas estão isoladas. Por outro lado, as moléculas de CFCs, mostram-se com comportamento inverso, ou seja, a formação dos aglomerados com metanol diminui a absorção das intensidades de infravermelho, quando comparadas com as moléculas isoladas.

O ponto de partida será a solução para equação de Schrödinger independente do tempo, que relaciona toda descrição quântica de um sistema. Considerando a equação independente do tempo, podemos escrevê-la na forma:

$$H\Psi = E\Psi$$

Onde  $H$  é o operador hamiltoniano para o sistema molecular, sendo seu autovalor de energia  $E$  e  $\Psi$  é a função da onda molecular. Para sistemas moleculares poliatômicos, a equação de Schrödinger não possui solução exata, para solucionar tal problema, se faz necessário certas aproximações ou simplificações nesta teoria. Uma das primeiras aproximações neste sentido é a aproximação de Born-Oppenheimer, pela qual o movimento nuclear e movimento eletrônico é separado no Hamiltoniano total, considerando a grande diferença de massa, e portanto da capacidade de movimentar entre núcleos e elétrons.

O Hamiltoniano molecular pode ser escrito como:

$$\hat{H} = T + V$$

$$= \sum_i^{\text{elétrons}} \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 + \sum_A^{\text{núcleo}} \frac{-\hbar^2}{2m_A} \nabla_A^2 + \sum_i^{\text{elétrons}} \sum_A^{\text{núcleo}} \frac{-e^2 Z_A}{r_{iA}} + \sum_{i>j}^{\text{elétrons}} \frac{e^2}{r_{ij}} + \sum_{A>B}^{\text{núcleo}} \frac{e^2 Z_A Z_B}{R_{AB}}$$

Onde  $T$  e  $V$  representam energia cinética e potencial do sistema molecular. Com a aproximação de Born-Oppenheimer, este Hamiltoniano reduz-se para:

$$\hat{H}_{\text{eletrônico}} = \sum_i^{\text{elétrons}} \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 + \sum_i^{\text{elétrons}} \sum_A^{\text{núcleo}} \frac{-e^2 Z_A}{r_{iA}} + \sum_{i>j}^{\text{elétrons}} \frac{e^2}{r_{ij}}$$

Resolver este Hamiltoniano simplificado ainda é bastante difícil. Diversos métodos de aproximação foram propostos com o intuito de resolver a equação de Schrödinger associada a um Hamiltoniano eletrônico para sistemas de muitos elétrons. Entre eles estão o método de Hartree-Fock (HF) e a Teoria do Funcional da densidade (DFT) que são usados constantemente nos estudos de estrutura eletrônica e modelagem molecular e serão utilizados neste projeto de PIBIC.

Embora exista bastante semelhança no desenvolvimento teórico dos métodos de HF e DFT, existem também diferenças fundamentais. Enquanto, em método *ab initio* de HF, que é uma extensão da molecular, a energia total é expressa em termos da função de onda, o DFT utiliza a densidade de elétrons para este fim. Enquanto, o HF é método de campo médio, ou seja, a repulsão eletrônica sofrida por cada elétron é substituída por um campo médio criado pelos outros elétrons do sistema, o DFT considera este fator importante da repulsão elétron-elétron, também conhecida como correlação eletrônica via os funcionais de densidade eletrônica. A grande vantagem de DFT está no baixo custo computacional comparado com os outros métodos *ab initio* e mais sofisticados conhecidos como *ab initio* pós-Hartree-Fock.

#### 4. Métodos utilizados

Utilizando o programa computacional Gaussian 03, inicialmente trabalhamos com a molécula de Gás Carbônico ( $\text{CO}_2$ ), onde foram feitos vários cálculos para a obtenção das energias eletrônicas, a correção de ponto-zero, momento dipolo, polarizabilidade média, anisotropia de polarizabilidade utilizando várias bases dos métodos Hartree-Fock (HF) e Funcional de Densidade (DFT) com a funcional B3LYP, para inicialmente aprender a manusear o programa computacional e posteriormente fazer análise de dados para conhecer melhor as propriedades eletrônicas do sistema alvo. Utilizar um conjunto de base adequada, que na realidade é uma combinação de funções gaussianas, para descrever a molécula, e é fundamental nos cálculos de estrutura eletrônica. Através deste trabalho inicial, além de conhecer a ferramenta computacional, conseguimos escolher as bases que serão usadas para os cálculos deste projeto. Os mesmos procedimentos foram efetuados para as moléculas de ácido carbônico ( $\text{H}_2\text{CO}_3$ ), Trifluorometano ( $\text{CHF}_3$ ), Difluorometano ( $\text{CH}_2\text{F}_2$ ). Escolhemos as bases 6-31+G(d) e 6-31++G (d, p) para este fim.

B3LYP – é um funcional híbrido, ou seja, faz uma mistura do funcional de troca de Hartree-Fock com o funcional de correlação e troca do DFT. Nele, os termos B3 representa a associação de três funcionais de troca de Becke, sendo que cada função associa o funcional de troca de Slater com o termo de correlação envolvendo o gradiente da densidade eletrônica e o termo LYP corresponde ao funcional de correlação eletrônica de Lee, Yang e Parr, que inclui termos de interação de spin local e não-local. Assim, há a união dos três funcionais de troca com o funcional de correlação eletrônica. Utilizando o programa Arguslab, inicialmente desenhemos a moléculas a serem trabalhadas.

## 5. Resultados e discussões

Na primeira parte deste projeto de PIBIC 2012-2013, aprendi a manusear dois programas computacionais, GAUSSIAN e GAUSSVIEW, que são ferramentas importantes para estudos teóricos de sistemas moleculares. Fizemos testes com vários conjuntos de base aplicando-as para calcular as estruturas e as propriedades elétricas (momento dipolo, polarizabilidade etc.) da molécula isolada de CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, conforme relatado no relatório parcial. Posteriormente, trabalhamos com os aglomerados de H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> com CHF<sub>3</sub>. Ambas moléculas são importantes do ponto de vista de poluição atmosférica, principalmente no efeito estufa, portanto, estudar o comportamento desses aglomerados é um assunto muito atual.

Na segunda etapa, calculamos as energias de Ligação ( $\Delta E$ ), Distorção ( $\Delta E_D$ ), Ressonância ( $\Delta E_R$ ) e parâmetros geométricos dos H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> isolado e aglomerados (H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>+CHF<sub>3</sub>) e (H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>+2CHF<sub>3</sub>), utilizando dois modelos diferentes de química quântica: HF/6-31++G(d,p) e B3LYP/6-31++G(d,p). Para calcular as propriedades energéticas usamos as equações a seguir:

$$\text{Energia de Ligação: } \Delta E = E_{(\text{H}_2\text{CO}_3+n\text{CHF}_3)} - (E_{\text{H}_2\text{CO}_3} + n E_{\text{CHF}_3}), \text{ onde } n=1, 2$$

A energia de ligação pode ser considerado como soma de energia de distorção (*a energia que os monômeros gastam para se ajustar de forma que interação eletrostática seja suficiente para dar a estabilidade para o aglomerado*) e energia de ressonância (*todo tipo de interação eletrostática, efeito de polarização ou transferência de carga*), ou seja,

$$\Delta E = \Delta E_D + \Delta E_R$$

Distância (Å)	H <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	
	HF	B3LYP
H5-O2	0,946	0,967
H6-O3	0,946	0,967
O2-C1	1,330	1,361
O3-C1	1,330	1,361
O4-C1	1,174	1,195
Ângulo (°)		
H5-O2-C1	114,7	114,3
O2-C1-O3	115,1	116,4
O3-C1-O4	122,4	121,8
C1-O3-H6	114,7	114,3
O2-C1-O4	122,4	121,8

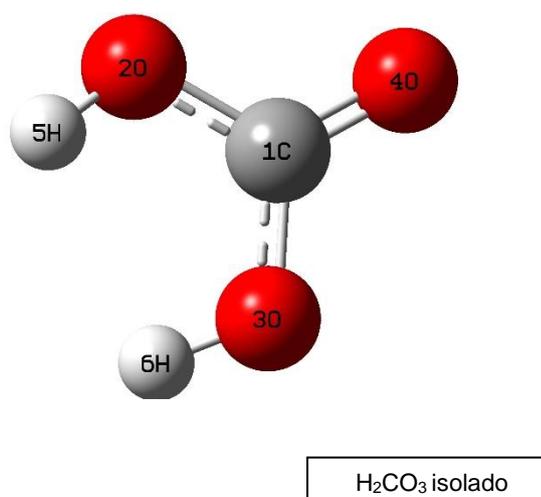
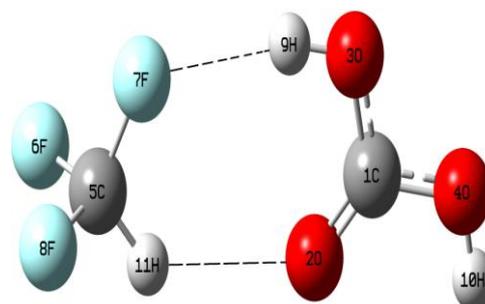


Tabela 1: Parâmetros Geométricos de H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> isolado.

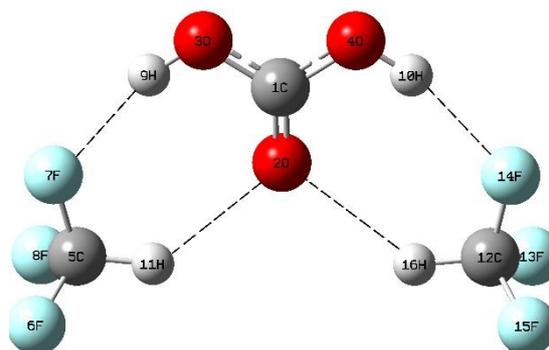
<b>H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>+CHF<sub>3</sub></b>		
Distância (Å)	HF	B3LYP
H9-O3	0,949	0,973
H10-O4	0,947	0,970
O3-C1	1,307	1,333
O4-C1	1,311	1,339
O2-C1	1,195	1,219
F7-H9...O3	2,141	2,000
C5-H11...O2	2,389	2,296
Ângulo (°)		
H9-O3-C1	109,4	107,9
O3-C1-O2	125,2	125,8



Dímero H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>+CHF<sub>3</sub>

Tabela 2: Parâmetros Geométricos de H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>+CHF<sub>3</sub>

<b>H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>+2CHF<sub>3</sub></b>		
Distância (Å)	HF	B3LYP
H9-O3	0,949	0,973
H10-O4	0,949	0,973
O3-C1	1,305	1,331
O4-C1	1,305	1,331
O2-C1	1,200	1,225
F7...H9-O3	2,105	1,989
C5-H11...O2	2,453	2,330
O4-H10...F14	2,106	1,988
C12-H16...O2	2,453	2,331
Ângulo (°)		
H9-O3-C1	109,8	108,3
O3-C1-O2	124,7	125,1
O4-C1-O2	124,7	125,1
C1-O4-H10	109,8	108,3



Trímero H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>+2CHF<sub>3</sub>

Tabela 3: Parâmetros Geométricos de H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>+2CHF<sub>3</sub>

<b>H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>+CHF<sub>3</sub></b>				
	ΔE	<ΔE>	ΔE <sub>D</sub>	ΔE <sub>R</sub>
HF	-4,72	-2,40	5,0 × 10 <sup>-4</sup>	-5,03
B3LYP	-4,79	-2,39	7,5 × 10 <sup>-4</sup>	-5,26
<b>H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>+2CHF<sub>3</sub></b>				
HF	-8,51	-2,13	10,1 × 10 <sup>-4</sup>	-9,14
B3LYP	-8,81	-2,20	15,5 × 10 <sup>-4</sup>	-9,78

Tabela 4: Propriedades energéticas de (H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>+ CHF<sub>3</sub>) e (H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>+2CHF<sub>3</sub>) na unidade de kcal/mol: Energia de Ligação (ΔE), Energia de Ligação por ligação de hidrogênio (<ΔE>), Energia de Distorção (ΔE<sub>D</sub>) e Energia de Ressonância (ΔE<sub>R</sub>).

	$\mu$		$\bar{\alpha}$		$\Delta\alpha$	
	HF	B3LYP	HF	B3LYP	HF	B3LYP
$\text{H}_2\text{CO}_3$	5,6659	5,4039	20,4977	24,5723	11,5175	14,3567
$\text{H}_2\text{CO}_3+\text{CHF}_3$	2,0095	1,7940	34,6553	41,7977	10,8691	15,4240
$\text{H}_2\text{CO}_3+2\text{CHF}_3$	0,2803	0,5090	49,2170	59,4957	11,2404	15,4142

Tabela 5: Os valores calculados de: Momento Dipolo ( $\mu$ ) Polarizabilidade Média ( $\bar{\alpha}$ ); Anisotropia da Polarizabilidade ( $\Delta\alpha$ ). Usando um conjunto de base 6-31++G(d, p) junto com os métodos teóricos de Hartree-Fock (HF) e Funcional de Densidade (DFT) com funcional B3LYP.

A partir da análise dos dados obtidos, verifica-se primeiramente que a molécula de ( $\text{H}_2\text{CO}_3$ ) isolada possui propriedades geométricas diferentes de quando encontra-se ligada com ( $\text{CHF}_3$ ) ou ( $2\text{CHF}_3$ ). Quando comparamos os valores obtidos na *tabela 2* e *3*, verificamos uma variação nas distâncias entre os átomos e uma variação no ângulo entre eles; o fato se deve a uma propriedade das moléculas, na qual elas buscam se rearranjar de tal modo, que fiquem em estado de equilíbrio energético; essa mudança na configuração geométrica gasta energia, na qual também foi calculada (*tabela 4*), que intitula-se *Energia de Distorção* ( $\Delta E_D$ ). Fazendo uma análise nas energias de distorção calculadas, verificamos que quando temos a molécula de ( $\text{H}_2\text{CO}_3$ ) ligada com ( $2\text{CHF}_3$ ), ou seja, quando temos o trímero ( $\text{H}_2\text{CO}_3+2\text{CHF}_3$ ), tem-se um maior gasto energético para ficarem nessa configuração do que quando ligamos ( $\text{H}_2\text{CO}_3$ ) com ( $\text{CHF}_3$ ), ou seja, ( $\text{H}_2\text{CO}_3+\text{CHF}_3$ ). Portanto, fazendo um comparativo em termos de *Energia de Distorção*  $\Delta E_D$ , temos:  $\text{H}_2\text{CO}_3+2\text{CHF}_3 > \text{H}_2\text{CO}_3+\text{CHF}_3$ .

Outra análise que fizemos no nosso projeto foi a *Energia de Ligação* ( $\Delta E$ ), que nos informa qual a mínima energia necessária no aglomerado, para que os átomos mantenham-se ligados uns com os outros. O dímero ( $\text{H}_2\text{CO}_3+\text{CHF}_3$ ) apresentou uma energia de ligação maior do que o trímero ( $\text{H}_2\text{CO}_3+2\text{CHF}_3$ ), conseqüentemente temos que:

1° - O dímero ( $\text{H}_2\text{CO}_3+\text{CHF}_3$ ) é mais estável que o trímero ( $\text{H}_2\text{CO}_3+2\text{CHF}_3$ );

2° - A distorção do dímero ( $\text{H}_2\text{CO}_3+\text{CHF}_3$ ) será menor do que a distorção do trímero ( $\text{H}_2\text{CO}_3+2\text{CHF}_3$ );

3° - A ressonância do dímero ( $\text{H}_2\text{CO}_3+\text{CHF}_3$ ) será maior do que a ressonância do trímero ( $\text{H}_2\text{CO}_3+2\text{CHF}_3$ ). Com o rearranjo das moléculas, ocorre um rebaixamento da energia de maior estabilidade.

Na *Energia de Ligação por ligação de Hidrogênio* ( $\langle \Delta E \rangle$ ) o dímero ( $\text{H}_2\text{CO}_3 + \text{CHF}_3$ ) apresentou energia menor do que o trímero ( $\text{H}_2\text{CO}_3 + 2\text{CHF}_3$ ). Isto significa que para cada ligação de hidrogênio, gasta-se menos energia para estabilizar o sistema no caso de ( $\text{H}_2\text{CO}_3 + \text{CHF}_3$ ).

O programa Gaussian nos apresenta os dados de polarizabilidade em valores coordenados  $\alpha_{xx}$ ,  $\alpha_{xy}$ ,  $\alpha_{yy}$ ,  $\alpha_{xz}$ ,  $\alpha_{yz}$ ,  $\alpha_{zz}$ . Então, para obtermos a polarizabilidade média e a anisotropia da polarizabilidade, utilizamos as seguintes equações:

$$\bar{\alpha} = \frac{1}{3}(\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz})$$

e

$$(\Delta\alpha)^2 = \frac{1}{2}[(\alpha_{xx} - \alpha_{yy})^2 + (\alpha_{yy} - \alpha_{zz})^2 + (\alpha_{zz} - \alpha_{xx})^2] + 3[(\alpha_{xy})^2 + (\alpha_{xz})^2 + (\alpha_{yz})^2]$$

Todas as variações de Momento Dipolo estão associadas às distribuições de cargas devido às ligações e interações com uma e depois, com duas moléculas de  $\text{CHF}_2$ . Espera-se que para distribuições assimétricas de carga geram valores de dipolo maiores e distribuições simétricas, gerando momentos de dipolo cada vez menores.

Comparando-se os valores de Polarizabilidade Média entre  $\text{H}_2\text{CO}_3$ ,  $\text{H}_2\text{CO}_3 + \text{CHF}_3$  e  $\text{H}_2\text{CO}_3 + 2\text{CHF}_3$ , concluímos que a nuvem eletrônica se distorceu mais para o trímero  $\text{H}_2\text{CO}_3 + 2\text{CHF}_3$  devido às interações eletrônicas. Observamos também, que para o método mais aprimorado B3LYP esse valor é maior. Portanto:  $\text{H}_2\text{CO}_3 + 2\text{CHF}_3 > \text{H}_2\text{CO}_3 + \text{CHF}_3 > \text{H}_2\text{CO}_3$ .

Para os valores encontrados de Anisotropia da Polarizabilidade vemos que, para o método B3LYP o trímero  $\text{H}_2\text{CO}_3 + 2\text{CHF}_3$  é um pouco mais simétrico que o dímero  $\text{H}_2\text{CO}_3 + \text{CHF}_3$ . Analisando os valores encontrados para o monômero  $\text{H}_2\text{CO}_3$ , este se encontra ainda mais simétrico, se comparados com os outros aglomerados. O que se espera é que as moléculas simétricas apresentem anisotropia aproximadamente nula. Porém, com a introdução da molécula de  $\text{CHF}_3$  esses aglomerados perdem ainda mais sua simetria.

## 6. Conclusões

Nossos esforços nesse trabalho visavam primeiramente, aprender a manusear as ferramentas computacionais para o desenvolvimento do projeto, escolher o conjunto de bases e a molécula alvo, no qual obtivemos muito êxito. Posteriormente, como segunda etapa, dedicamo-nos no estudo das interações intermoleculares entre ( $\text{H}_2\text{CO}_3$ ), ( $\text{CHF}_3$ ) e ( $2\text{CHF}_3$ ) focando a formação de ligações de hidrogênio convencional e não convencional. E por último analisamos os efeitos de formação dessas ligações de hidrogênio nas propriedades eletrônicas do sistema, onde conseguimos obter resultados muito satisfatórios e conclusivos a respeito dessas interações. Futuramente, para o nosso próximo projeto, iremos colocar esses sistemas no meio solvente e analisaremos as mudanças nas propriedades dos aglomerados.

Concluída essas três etapas faremos a elaboração da apresentação final para o congresso e publicaremos um artigo científico do nosso projeto.

## 7. Referências Bibliográficas

- [1] <http://www.mudancasclimaticas.andi.org.br/content/gases-de-efeito-estufa-gee>.
- [2] <http://www.prof2000.pt/users/filipe/pessoa/ambiente/problemas-ambiente.htm>.
- [3] M. A. Tomasoni, K. R. Tomasoni, *Atmosfera em transformação: o ozônio e os CFCs, certezas e incertezas*.
- [4] J. O. Ayoade, *Introdução à climatologia para os trópicos*. São Paulo (1986).
- [5] G. A. Jeffrey e W. Saenger, *Hydrogen Bonding in Biological Structures*, Springer-verlag, Berlin, 1991
- [6] S. Scheiner, *Hydrogen Bonding: A Theoretical Perspective*, Oxford University Press, New York, 1997
- [7] W. Qian e S. Krimm, *J. Phys. Chem A* 106 (2002) 6628
- [8] R. Ramaekers, J. Pajak, B. Lambie e G. Maes, *J. Chem. Phys* 120 (2004) 4182
- [9] A. Chaudhuri, P. K. Sahu e S. Lee, *J. Chem. Phys.* 120 (2004) 170
- [10] Y. He, C. Wu e W. Kong, *J. Phys. Chem. A* 109 (2005) 748
- [11] S. Scheiner, T. Kar an Y. Gu, *J. Biol. Chem.* 276, 9832 (2001)
- [12] J. E. Del Bene e M. J. T. Jordan, *J. Am. Chem Soc.* 122, 4794-4797 (2000)
- [13] P. Chaudhuri e S. Canuto, *Chem. Phys. Lett.* 491, 86-90 (2010)
- [14] E. Orestes, P. Chaudhuri e S. Canuto, *Molecular Physics*, 110, 297-306 (2012)
- [15] P. P. Bera, J. S. Francisco and T. J. Lee, *J. Phys. Chem. A*, 113, 12694-12699 (2009)
- [16] P.P. Bera, J.S. Francisco, T.J. Lee. *PNAS*, 107, 9049-9054 (2010)
- [17] I. Alkorta, S. Maluendes. *J. Phys. Chem*, 99, 6457-6460 (1995)
- [18] F. S. Medeiros Jr., *Assinatura Molecular do Aquecimento Global: um estudo teórico de aglomerados de moléculas de gás de efeito estufa* (dissertação de Mestrado, UFAM, 2001), orientador: Prof. Dr. Puspitapallab haudhuri

## 8. Cronograma

Nº	Descrição	Ago	Set	Out	Nov	Dez	Jan	Fev	Mar	Abr	Mai	Jun	Jul
1	Levantamento bibliográfico da função de correlação de pares	X	X										
2	Estudo dos princípios de mecânica quântica		X	X	X								
3	Estudo dos métodos de química quântica (HF, MP2 e DFT)			X	X	X							
4	Obtenção de resultados na fase gasosa			X	X	X	X	X	X				
5	Analisar dados e tentar estender o estudo com outros métodos						X	X	X	X	X		
6	Elaboração do Resumo e Relatório final											X	
7	Preparação da Apresentação Final para o Congresso												X