Comparação entre resultados experimentais e cálculos teóricos para os espectros Raman e infravermelho do perileno PTCD-Pr

Bruno Pinheiro Toniato*, Priscila Alessio Constantino, Mateus D. Maximino. Faculdade de Ciências e Tecnologia. Universidade Estadual Paulista (UNESP), Presidente Prudente, Licenciatura em Física, *bruno.toniato@hotmail.com.

Palavras Chave: *Espectro Vibracional, B3LYP (DFT), Perileno.*

Introdução

A união entre a Teoria Quântica da matéria e a grande capacidade de processamento dos computadores contemporâneos proporciona uma ferramenta de extrema importância para a análise das estruturas fundamentais. A simulação de propriedades moleculares é extensivamente utilizada atualmente[1]. A ciência da Química Computacional provê um excelente complemento aos experimentos laboratoriais e, assim, a comparação entre teoria e experimento é fundamental para estudos de espectroscopia molecular avançados.

Objetivo

Determinar os espectros experimentais dos modos vibracionais do perileno PTCD-Pr, por meio da espectroscopia Raman e FTIR, e então comparar com os espectros obtidos mediante cálculos teóricos, realizados no software Gaussian 09.

Material e Métodos

Para calcular o espectro vibracional teórico, é necessário, primeiramente, otimizar a geometria da molécula, e então, após esse processo, calcula-se as frequências associadas a cada vibração. O software utilizado para tais tarefas foi o Gaussian 09. Já que o espectro vibracional está intrinsecamente associado com a estrutura da molécula, é necessário que uma base de dados apropriada seja escolhida para o processo de otimização. Portanto, o método selecionado foi B3LYP (DFT) – Ground State, sendo o conjunto de bases 3-21G[2]. As frequências também foram calculadas por meio do mesmo método e conjunto de bases. Para obter o espectro experimental, foi utilizado o espectrógrafo micro-Raman Renishaw, modelo in-Via. As medidas foram realizadas com o laser de 514 nm.

Resultados e Discussão

Na Figura 1, são apresentados os espectros obtidos. Já a geometria otimizada resultante do cálculo teórico é apresentada na Figura 2.

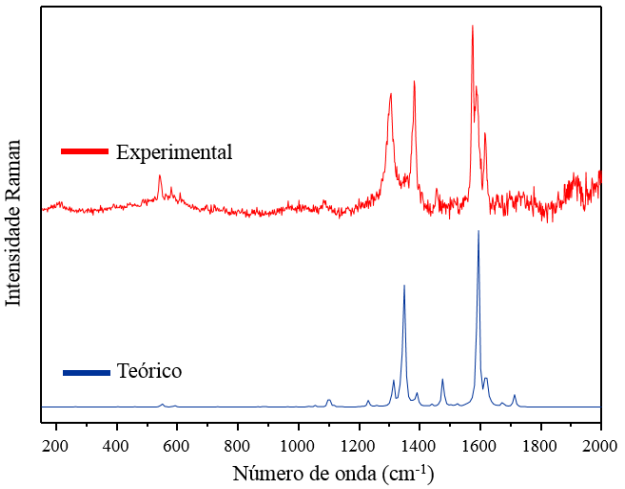


Figura 1. Espectro Teórico e Experimental.

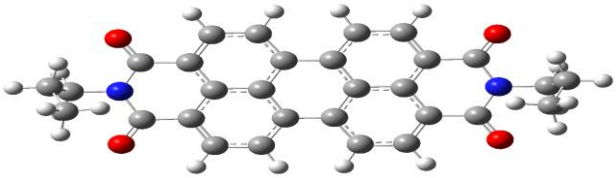


Figura 2. Geometria Otimizada do PTCD-Pr.

Conclusões

Os espectros obtidos apresentam picos próximos. Os modos de vibração do perileno[3] estão de acordo com o esperado. Portanto, o método B3LYP (DFT) – Ground State e o conjunto de bases 3-21G apresentaram resultados próximos ao experimental, evidenciando que são boas escolhas para o cálculo de parâmetros geométricos e espectro vibracional dos perilenos. Estes resultados serão utilizados no futuro para determinação da organização molecular de filmes finos baseados no perileno estudado.

Agradecimentos

FAPESP, CNPq e Capes.

[1] Ira N. Levine. Quantum Chemistry: 6th ed. New Jersey: Pearson Education, 2008. ISBN-13: 978-0-13-613106-9.
[2] Frank Neese. Prediction of molecular properties and molecular spectroscopy with density functional theory. Coordination Chemistry Reviews (2008) - Volume 253. doi: 10.1016/j.ccr.2008.05.014.
[3] Kate K. Onga*, James O. Jensena, Hendrik F. Hamekab. Theoretical studies of the infrared and Raman spectra of perylene. Journal of Molecular Structure (Theochem) 459 (1999) 131–144. doi: 10.1016/S0166-1280(98)00266-8.