

# Espectroscopia Eletrônica de Moléculas Halogenadas

Adevânia J. da Silva<sup>1</sup>, Manoel G. P. Homem<sup>2\*</sup>

<sup>1,2</sup>Departamento de Química - Universidade Federal de São Carlos  
Rod. Washington Luis, km 235 - São Carlos - SP – 13.565-905

\*email: adevaniajustino@gmail.com

Sabe-se que a destruição da camada de ozônio está relacionada à emissão de compostos orgânicos voláteis na atmosfera, como compostos halogenados, e que sua recuperação sobre a Antártica reflete a eficácia das medidas adotadas no Protocolo de Montreal.<sup>1</sup> Contudo, outras substâncias, de menor poder ofensivo e não incluídas no Protocolo de Montreal, ainda são produzidas e utilizadas.<sup>2,3</sup> Nesse sentido, realizou-se uma investigação teórica e experimental sobre a excitação de estados de valência das moléculas de diclorometano ( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ) e triclorometano ( $\text{CHCl}_3$ ) em fase gasosa. Experimentalmente, a molécula de  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  foi investigada com o emprego de espectroscopia de perda de energia de elétrons com feixes incidentes de 100 eV. A partir desses dados, o espectro de fotoabsorção (força de oscilador óptica) foi gerado na faixa de energia de 5 a 21 eV aplicando a condição de Bethe-Born.<sup>4</sup> Teoricamente, mostraremos a investigação dos processos de ionização direta das moléculas de  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  e  $\text{CHCl}_3$  usando o pacote computacional ePolyScat-E3. Dados de seções de choque de fotoionização e parâmetros de assimetria para a ionização dos orbitais mais externos dessas moléculas serão mostrados desde o limiar de ionização até 40 eV. Especificamente, foram investigadas as ionizações dos orbitais  $7b_2$ ,  $3b_1$ ,  $9a_1$ ,  $2a_2$ , e  $6b_2$  para o  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ , e dos orbitais  $2a_2$ ,  $9e$ ,  $9a_1$ ,  $8e$ ,  $7e$ ,  $8a_1$  e  $7a_1$  para a molécula de  $\text{CHCl}_3$ .<sup>5,6</sup>

## Referências

1. Zambri, B. *et al.* (2021). Emergence of Southern Hemisphere stratospheric circulation changes in response to ozone recovery. *Nature Geoscience*, 14(9), 638-644.
2. Simmonds, P. G. *et al.* (2006). Global trends, seasonal cycles, and European emissions of dichloromethane, trichloroethene, and tetrachloroethene from the AGAGE observations at Mace Head, Ireland, and Cape Grim, Tasmania. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 111(D18).
3. Hossaini, R. *et al.* (2017). The increasing threat to stratospheric ozone from dichloromethane. *Nature Communications*, 8(1), 15962.
4. INOKUTI, M. Inelastic collisions of fast charged particles with atoms and molecules the Bethe theory revisited. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 43, n. 3, p. 297, 1971.
5. LANGE, E. *et al.* (2020). The electronic excited states of dichloromethane in the 5.8-10.8 eV energy range investigated by experimental and theoretical methods. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, v. 253, p. 107172, 2020. ISSN 0022-4073.
6. SILVA, Adevania Justino da. (2022). Espectroscopia eletrônica de moléculas halogenadas. (Mestrado em Química) - Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2022. Disponível em: <https://repositorio.ufscar.br/handle/ufscar/18096>.

## Agradecimentos

Este trabalho foi realizado com o apoio da CAPES — código de financiamento 001 —, FAPESP (2015/08258-2), e CNPq, através da concessão da bolsa de estudos vinculada ao processo 130554/2021-9.