



ESTUDO TEÓRICO DE INTERESSE ATMOSFÉRICO: REAÇÕES FOTODISSOCIATIVAS DA MOLÉCULA $C_2H_2F_3Cl$

Maria Eduarda Tomé dos Santos¹, Prof. Dr. Ezequiel Fragoso Vieira Leitão ²

RESUMO

As problemáticas ambientais envolvendo o aquecimento global e à redução da camada de ozônio são temáticas largamente discutidas na sociedade atual, isto porque os poluentes atmosféricos causam grandes desequilíbrios, modificando as condições de vida no planeta. Um dos principais contaminantes citados são os clorofluorcarbonos (CFC's), contudo foi estabelecido pelo Protocolo de Montreal e Kyoto que a utilização desses compostos deveria cessar e teriam que ser substituídos pelos hidroclorofluorcarbonos (HCFC's). Para compreender como os HCFC's se comportam na atmosfera superior é necessário o entendimento de sua fotodissociação. A molécula $C_2H_2F_3Cl$ (HCFC-133a) é uma substância proveniente da ação antrópica que destrói a camada de ozônio e sua remoção da atmosfera é parcialmente realizada pela radiação UV, com base nisto, um detalhamento de sua fotoquímica é essencial para auxiliar na modelagem de seus efeitos e comportamentos na atmosfera, além de colaborar para uma maior elucidação a respeito do mecanismo de ação destes compostos na atmosfera. Este trabalho, empregou cálculos de estrutura eletrônica tendo como base a Teoria do Funcional de Densidade Dependente do Tempo (TDDFT), caracterizando os caminhos fotodissociativos do HCFC-133a, estudados teoricamente, identificando seu primeiro estado excitado (singlete) proveniente de transições eletrônicas, sendo possível a interpretação e o esclarecimento desses caminhos dissociativos.

Palavras-chave: Hidroclorofluorcarbonos, Fotodissociação, Atmosfera.

¹Graduanda em licenciatura em Química, Unidade Acadêmica de Ciências Exatas e da natureza, UFPG, Cajazeiras, PB, e-mail: maria.tome@estudante.ufcg.edu.br.

²Doutorado em Química – Universidade Federal da Paraíba, Professor adjunto da Universidade Federal de Campina Grande, Unidade Acadêmica de Ciências Exatas e da Natureza, UFPG, Cajazeiras, PB, e-mail: ezequiel.fragoso@professor.ufcg.edu.br.

THEORETICAL STUDY OF ATMOSPHERIC INTEREST: PHOTODISSOCIATIVE REACTIONS OF THE C₂H₂F₃Cl MOLECULE

ABSTRACT

The environmental problems involving global warming and the reduction of the ozone layer are widely discussed themes in today's society, because atmospheric pollutants cause great imbalances, modifying the conditions of life on the planet. One of the main contaminants cited is chlorofluorocarbons (CFCs), however it was established by the Montreal and Kyoto Protocol that the use of these compounds should cease and would have to be replaced by hydrochlorofluorocarbons (HCFCs). To understand how HCFCs behave in the upper atmosphere, it is necessary to understand their photodissociation. The molecule C₂H₂F₃Cl (HCFC-133a) is a substance from anthropogenic action that destroys the ozone layer and its removal from the atmosphere is partially carried out by UV radiation, based on this, a detailing of its photochemistry is essential to assist in the modeling of its effects and behaviors in the atmosphere, in addition to collaborating for a greater elucidation about the mechanism of action of these compounds in the atmosphere. This work used electronic structure calculations based on the Time-Dependent Density Functional Theory (TDDFT), characterizing the photodissociative pathways of HCFC-133a, studied theoretically, identifying its first excited state (singlet) arising from electronic transitions, making it possible to interpret and clarify these dissociative paths.

Keywords: Hydrochlorofluorocarbons, Photodissociation, Atmosphere.