

OBTENÇÃO DO ESPECTRO INFRAVERMELHO DO METAMIDOFÓS DFT

Congresso Online Nacional de Física, 1ª edição, de 29/03/2021 a 31/03/2021
ISBN dos Anais: 978-65-86861-90-7

LEAL; Camilly Martins¹

RESUMO

O composto chamado metamidofós é resultado da degradação química de um agrotóxico muito utilizado no mundo todo, o acefato. Como resultado disso, surge a preocupação em detectar resíduos dessas substâncias no meio ambiente, por exemplo. Nesse sentido, o objetivo desse trabalho é demonstrar uma alternativa para essa problemática baseada na caracterização do espectro infravermelho do metamidofós. Para isso, foi realizado o desenho molecular no software Avogadro e realizada a otimização geométrica e cálculo das frequências com uso da Teoria do Funcional da Densidade (DFT) no ambiente do software Gaussian, utilizando o método B3LYP com as funções de base 6-31g(d). O espectro obtido permitiu a visualização de 39 pontos de frequências características e dos picos de transmitância marcantes da substância, com destaque para os pontos com forte percentual de transmitância: 96,86% ($586,24\text{ cm}^{-1}$) e 99,96% ($1010,35\text{ cm}^{-1}$). Resultados desse tipo podem ser revelados por técnicas experimentais, mas ressaltamos a rapidez com que se realiza a espectroscopia com métodos computacionais. Por fim, obteve-se todas as bandas características do infravermelho para o metamidofós, um resultado que pode auxiliar outras técnicas experimentais e complementares.

PALAVRAS-CHAVE: Espectroscopia, DFT, agrotóxicos

¹ Instituto Federal do Pará - Campus Castanhal, camimartins272@gmail.com