

Recebido em 04/2012. Aceito para publicação em 08/2012.

TRATAMENTO MATEMÁTICO DOS MODOS VIBRACIONAIS DA MOLÉCULA DE CLOROFÓRMIO

MATHEMATICAL TREATMENT OF VIBRATIONAL MODES OF THE CHLOROFORM MOLECULE

Maria Helena Rodrigues Mesquita¹

Adeslaine Negrini Reche¹

Patrícia Marcondes dos Santos²

Yoshiyuki Hase³

Mituo Uehara^{4*}

Kumiko Koibuchi Sakane⁴

RESUMO: As frequências dos modos vibracionais da molécula de clorofórmio foram determinadas teoricamente. Os cálculos exigiram um conhecimento de forças interatômicas, comprimentos de ligação e seus ângulos a fim de obter a sua configuração. A molécula pertence ao grupo de ponto C_{3v} com nove vibrações fundamentais. As coordenadas cartesianas, internas, e de simetria e o campo de força serviram de entrada para um pacote de programas NCT (Tratamento de Coordenadas Normais), para obter frequências vibracionais, distribuição de energia potencial (DEP) e constantes de força de ligação. As atribuições das bandas dos espectros infravermelhos foram feitas baseadas na distribuição de energia potencial calculada.

Palavras-chave: espectroscopia no infravermelho; análise de coordenadas normais; molécula de clorofórmio.

ABSTRACT: The normal vibrational modes of the chloroform molecule were determined theoretically. The calculations required previous knowledge of the force constants, bond lengths, and angles in order to estimate the configuration of chloroform. The molecule belongs to the C_{3v} point group with nine fundamental vibrational modes. The Cartesian, internal, and symmetry coordinates, along with the force field were used and inputted into the normal coordinate analysis package (NCT) in order to obtain the frequencies, the distribution of the potential energy (DEP), and force constants. The assignment of bands of the infrared spectrum of chloroform was based in the calculated distribution of the potential energy.

Keywords: infrared spectroscopy; normal coordinate analysis; chloroform molecule.

¹ Mestranda em Bioengenharia - Universidade do Vale do Paraíba - Univap. E-mail: mhrmesquita@hotmail.com; lainereche@hotmail.com.

² Doutoranda em Engenharia Biomédica - Univap. E-mail: patriciams@univap.br.

³ Doutor em Química (Físico-Química) - Universidade de São Paulo - USP e Professor da Universidade Estadual de Campinas - Unicamp. E-mail: hase@iqm.unicamp.br.

⁴ Doutor(a) em Física - Instituto Tecnológico de Aeronáutica - ITA e Professor(a) Titular da Univap. E-mail: kumiko@univap.br.

* In memoriam.

1. INTRODUÇÃO

Nos estudos da espectroscopia vibracional, um dos problemas principais é o melhor entendimento dos modos normais da vibração de molécula e a atribuição dos dados experimentais observados nos espectros infravermelhos.

Uma das técnicas matemáticas mais simples é a análise de coordenadas normais para obter frequências vibracionais fundamentais e suas atribuições por meio da distribuição de energia potencial. Comparando as frequências calculadas e experimentais, pode-se obter os valores de constantes de força de ligação química, fornecendo as indicações das naturezas das ligações químicas e conformações moleculares (COLTHUP; DALY; WIBERLEY, 1990; SALA, 1995).

O método matemático usado para definir estruturas moleculares baseado na análise dos espectros vibracionais exige uma formulação de hipóteses sobre estruturas prováveis. Estas, em geral, são baseadas nos valores experimentais existentes na literatura ou no conhecimento do pesquisador (BARBOSA, 2007; SILVERSTEIN; WEBSTER; KIEMLE, 2007). Antes de recorrer para a qualquer análise matemática, recomenda-se fazer uma tentativa de atribuição das frequências aos modos vibracionais, geralmente, comparando com moléculas semelhantes. O objetivo deste trabalho é procurar mostrar que a aplicação das propriedades de simetria e da teoria de grupo permite que as atribuições das frequências vibracionais não sejam puramente empíricas, mas que tenham uma base matemática. Para moléculas pequenas, esses tratamentos são indispensáveis para identificar as suas estruturas.

Muitas vezes as moléculas maiores podem ser divididas, hipoteticamente, em várias partes com simetrias localmente definidas, tais com C_{2v} ou C_{3v} . As vibrações características dos grupos $-CH_2$ e $-CH_3$ possuem essas simetrias. Esses fragmentos são analisados, separadamente, como se fossem moléculas menores. Tais análises são, muitas vezes, úteis para caracterizar as frequências vibracionais de biomoléculas (lipídios, proteínas, polissacarídeos, ácidos nucleicos) presentes em sistemas biológicos. Pode-se reconhecer a presença dessas vibrações muitas vezes alteradas e até distorcidas, devido à influência dos fatores externos, tais como algumas toxinas, medicamentos ou alterações nas conformações moleculares (DIEM; GRIFFITHS; CHALMERS, 2008; MANTSCH; CHAPMAN, 1996; STUART, 1997). Variações, na geometria molecular, refletem, geralmente, nas constantes de ligação entre dois átomos. Essas informações estruturais contribuem para o melhor entendimento da complexidade de um sistema biológico.

O presente trabalho consiste em construir um modelo matemático, formado por um conjunto de coordenadas cartesianas, internas, de simetria e campo de força que servem de dados de entrada para um pacote de programas NCT. Estes calculam as frequências vibracionais da molécula e constante de força de ligação química, comparando os valores experimentais e calculados (HASE, 2004).

A molécula de clorofórmio foi escolhida como exemplo para análise vibracional, pois pertence ao grupo de ponto C_{3v} , mesma propriedade de simetria do grupo $-CH_3$, muitas vezes encontrado em biomoléculas. O tratamento de análise de coordenadas normais prevê nove vibrações fundamentais, sendo três modos A_1 e três duplamente

degenerados E. (COLTHUP; DALY; WIBERLEY, 1990). E o seu espectro infravermelho possui as bandas definidas que permitem uma boa comparação entre as frequências calculadas e experimentais.

A fórmula estrutural da molécula de clorofórmio é mostrada na Fig. 1.

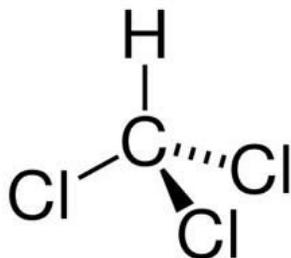


Fig. 1 - Fórmula estrutural da molécula de clorofórmio
Fonte: LOPES (2012).

2. OBTENÇÃO DOS ESPECTROS INFRAVERMELHOS

O espectro de clorofórmio no estado líquido foi obtido utilizando cela de cristais de KBr de um caminho ótico de 0,114 mm, na faixa de 4000 a 600 cm^{-1} , com resolução de 4 cm^{-1} , no modo de transmissão, com 32 varreduras a uma temperatura controlada de 20°C.

O espectrofotômetro utilizado foi o Spectrum GX FT-IR da PerkinElmer. Os espectros foram pré-processados com o software Spectrum 5.3 (PerkinElmer), em que foram feitas suavização espectral por meio do algoritmo Savitzky Golay (9 pontos).

A Fig. 2 mostra o espectro infravermelho de clorofórmio na região de 3500 a 500 cm^{-1} .

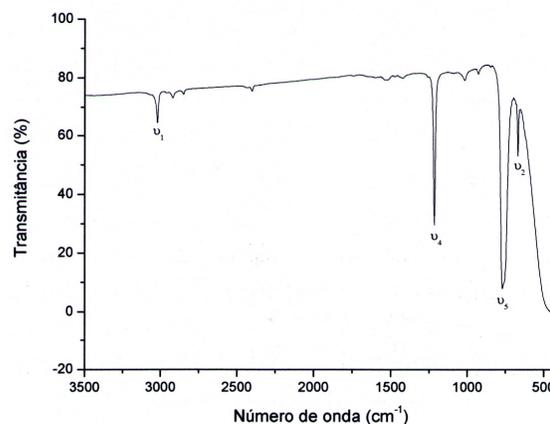


Fig. 2 - Espectro infravermelho de clorofórmio.

3. ANÁLISE TEÓRICA DAS VIBRAÇÕES DE MOLÉCULAS

3.1 Determinação de coordenadas internas e construção de coordenadas de simetria

Para este trabalho, o cálculo do número de frequências é feito para estrutura possível da molécula livre do clorofórmio usando os recursos da teoria de grupos de ponto.

A teoria de grupos aplicada às vibrações moleculares acha-se minuciosamente desenvolvida num grande número de livros de espectroscopia (BALL, 2005; COLTHUP; DALY; WIBERLEY, 1990; SALA, 1995).

Aplicamos a simetria C_{3v} para molécula livre do clorofórmio.

Os seguintes valores dos comprimentos e de ângulo de ligação foram utilizados (COLTHUP; DALY; WIBERLEY, 1990): C – H

1.093 $\overset{\circ}{\text{Å}}$; C – Cl 1.770 $\overset{\circ}{\text{Å}}$; Cl – C – Cl 112°.

Os pesos atômicos em u.m.a. foram usados (COLTHUP; DALY; WIBERLEY, 1990): C = 12.00000; H = 1.007825; Cl = 35.45300.

As coordenadas cartesianas, de todos os átomos constituintes da molécula, são apresentadas na Tabela 1 (COLTHUP; DALY; WIBERLEY, 1990).

Tabela 1 - Coordenadas cartesianas e massas atômicas da molécula de clorofórmio

	x	y	z	Massa atômica
1.H	0	0	1.093	1.007825
2.C	0	0	0	12.01115
3.Cl	1.467	0.847	-0.512	35.45300
4.Cl	0	-1.694	-0.512	35.45300
5.Cl	1.467	0.847	-0.512	35.45300

O número de frequências, em cada espécie de simetria, é obtido, para a molécula de clorofórmio, com a simetria C_{3v} (COLTHUP; DALY; WIBERLEY, 1990).

$$\Gamma_v = 3A_1 + 3E, \quad (1)$$

em que A_1 e E são espécies de simetria. Portanto, a teoria dos grupos prevê três modos normais para espécie A_1 e três modos degenerados, para espécie E .

A Fig. 3 ilustra nove modos normais para a molécula de clorofórmio.

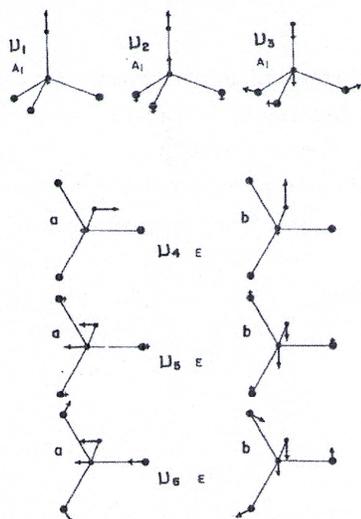


Fig. 3 - Nove modos normais para a molécula de clorofórmio.

Fonte: COLTHUP; DALY; WIBERLEY (1990).

As coordenadas internas estão apresentadas na Fig. 4 e são:

$$\begin{aligned} R_1 &= r \\ R_2 &= t_1 \\ R_3 &= t_2 \\ R_4 &= t_3 \\ R_5 &= \alpha_1 \\ R_6 &= \alpha_2 \\ R_7 &= \alpha_3 \\ R_8 &= \beta_1 \\ R_9 &= \beta_2 \\ R_{10} &= \beta_3 \end{aligned}$$

r ligação de valência: C – H
 t_i $i=1$ até 3 ligação de valência: C – Cl
 α_i $i=1$ até 3 ângulo de valência: Cl – C – Cl
 β_i $i=1$ até 3 ângulo de valência: H – C – Cl

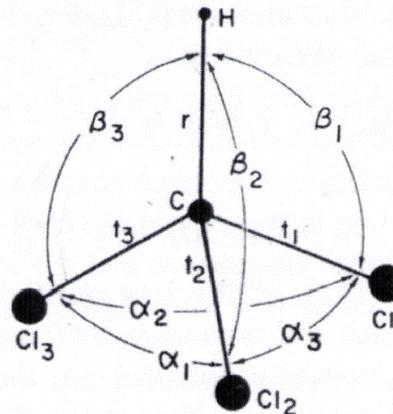


Fig. 4 - Coordenadas internas da molécula de clorofórmio.

Fonte: COLTHUP; DALY; WIBERLEY (1990).

A energia potencial de uma molécula é uma função da distorção da molécula a

partir da posição de equilíbrio.

Assim, pode-se escrever nossa função potencial com as prováveis interações em coordenadas internas (COLTHUP; DALY; WIBERLEY, 1990).

As constantes de estiramento são:

$$k1 \quad k_r$$

$$k2 \quad k_{ti} \quad i = 1 \text{ até } 3$$

As constantes de deformação angular são:

$$k3 \quad k_{\alpha i} \quad i = 1 \text{ até } 3$$

$$k4 \quad k_{\beta i} \quad i = 1 \text{ até } 3$$

As constantes de interação são:

$$k5 \quad k_{rti} \quad i = 1 \text{ até } 3$$

$$k6 \quad k_{tij} \quad i = 1 \text{ até } 3, j = 1 \text{ até } 3 \text{ e } i \neq j$$

$$k7 \quad k_{roi} \quad i = 1 \text{ até } 3$$

$$k8 \quad k_{r\beta i} \quad i = 1 \text{ até } 3$$

$$k9 \quad k_{ti\alpha j} \quad i = 1 \text{ até } 3, j = 1 \text{ até } 3 \text{ e } i \neq j$$

$$k10 \quad k_{ti\beta j} \quad i = 1 \text{ até } 3, j = 1 \text{ até } 3 \text{ e } i = j$$

$$k11 \quad k_{ti\alpha j} \quad i = 1 \text{ até } 3, j = 1 \text{ até } 3 \text{ e } i = j$$

$$k12 \quad k_{ti\beta j} \quad i = 1 \text{ até } 3, j = 1 \text{ até } 3 \text{ e } i \neq j$$

$$k13 \quad k_{\alpha i \alpha j} \quad i = 1 \text{ até } 3, j = 1 \text{ até } 3, i \neq j$$

$$k14 \quad k_{\beta i \beta j} \quad i = 1 \text{ até } 3, j = 1 \text{ até } 3, i \neq j$$

$$k15 \quad k_{\alpha i \beta j} \quad i = 1 \text{ até } 3, j = 1 \text{ até } 3 \text{ e } i = j$$

$$k16 \quad k_{\alpha i \beta j} \quad i = 1 \text{ até } 3, j = 1 \text{ até } 3, i \neq j$$

As coordenadas de simetria para a molécula de clorofórmio, são apresentadas a seguir: (COLTHUP; DALY; WIBERLEY,

1990).

Espécie de simetria A_1

$$S_1 = R_1 \quad (2)$$

$$S_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}(R_2 + R_3 + R_4) \quad (3)$$

$$S_3 = \frac{1}{\sqrt{6}}(R_5 + R_6 + R_7 - R_8 - R_9 - R_{10}) \quad (4)$$

Espécie de simetria E

$$S_1 = \frac{1}{\sqrt{6}}(2R_2 - R_3 - R_4) \quad (5)$$

$$S_2 = \frac{1}{\sqrt{6}}(2R_5 - R_6 - R_7) \quad (6)$$

$$S_3 = \frac{1}{\sqrt{6}}(2R_8 - R_9 - R_{10}) \quad (7)$$

$$S_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}(R_3 - R_4) \quad (8)$$

$$S_5 = \frac{1}{\sqrt{2}}(R_6 - R_7) \quad (9)$$

$$S_6 = \frac{1}{\sqrt{2}}(R_9 - R_{10}) \quad (10)$$

3.2 Vibrações moleculares e coordenadas normais

Uma molécula de clorofórmio pode ser pensada como um conjunto de osciladores acoplados. Faz-se desacoplar esses osciladores em osciladores harmônicos simples, descritos como coordenadas normais com o uso de propriedades de simetria da molécula e da teoria do grupo (COLTHUP; DALY; WIBERLEY, 1990; HASE, 2004; SALA, 1995).

Espera-se uma equação de movimento de nono grau $3N-6=9$ (em que N

é igual a nove e representa o número de átomos da molécula de clorofórmio: CHCl_3) para a molécula em estudo e suas raízes estariam relacionadas às frequências vibracionais. Utilizando propriedades de simetria e teoria de grupo C_{3v} , pode-se fatorar as equações em equações de menor grau, mais fáceis de serem resolvidas (COLTHUP; DALY; WIBERLEY, 1990; HASE, 2004; SALA, 1995).

Deve-se efetuar transformações de coordenadas aplicando as operações de simetria do grupo ao qual a molécula pertence para se chegar às coordenadas normais, que descrevem vibrações da molécula. A cada operação é associada uma matriz de transformação e um dos objetivos é determinar essas matrizes (COLTHUP; DALY; WIBERLEY, 1990; HASE, 2004; SALA, 1995).

Em algumas etapas, essas transformações envolvem processos numéricos bastante complexos e o tratamento utilizado é o método de matriz GF de Wilson (WILSON; DECIUS; CROSS, 1955).

A energia cinética da molécula é expressa em coordenadas cartesianas de deslocamento:

$$2T = \sum_i (m_i \Delta \dot{x}_i^2 + m_i \Delta \dot{y}_i^2 + m_i \Delta \dot{z}_i^2) \quad (11)$$

A sua energia potencial é descrita em coordenadas internas que permitirão melhor visualização de campo de forças moleculares:

$$2V = \sum_{i,j} k_{i,j} (R_i R_j) \quad (12)$$

em que m é massa atômica, Δx , Δy e Δz são coordenadas cartesianas de deslocamento, k constante de força de ligação e R é

coordenada interna.

A energia cinética é mais facilmente expressa na forma matricial:

$$2T = \dot{X}^+ M \dot{X} \quad (13)$$

onde

$$M = \begin{pmatrix} m_1 & & & & \\ & m_2 & & & \\ & & m_3 & & \\ & & & m_4 & \\ & & & & m_5 \end{pmatrix} \quad (14)$$

Os elementos fora da diagonal são nulos.

Seja B_R uma matriz de transformação de coordenadas cartesianas de deslocamento em coordenadas internas:

$$R = B_R X \quad (15)$$

$$X = B_R^{-1} R \quad (16)$$

A expressão da energia cinética em coordenadas internas será:

$$2T = R^+ (B_R^{-1}) M (B_R^{-1}) R \quad (17)$$

$$2T = R^+ G_R^{-1} R \quad (18)$$

onde

$$G_R^{-1} = (B_R^{-1}) M B_R^{-1} \quad (19)$$

A energia potencial em geral é expressa em coordenadas internas, pois o significado físico das constantes de força se torna imediato.

$$2V = R^+ F_R R \quad (20)$$

As coordenadas de simetria são introduzidas para ter o fatoramento das matrizes de energias cinética e potencial.

As coordenadas de simetria

relacionam-se com as coordenadas internas por matriz de transformação U.

$$S = UR \quad (21)$$

em que

$$U^{-1} = U^+ \quad (22)$$

A expressão da energia cinética em coordenadas de simetria será escrita por:

$$2T = S^+ U G_R^{-1} U^+ S \quad (23)$$

$$2T = S^+ G_S^{-1} S \quad (24)$$

em que

$$G_S^{-1} = U G_R^{-1} U^+ \quad (25)$$

A expressão da energia potencial em coordenadas de simetria será:

$$2V = S^+ U F_R U^+ S \quad (26)$$

$$2V = S^+ F_S S \quad (27)$$

em que

$$F_S = U F_R U^+ \quad (28)$$

G e F são as matrizes introduzidas por Wilson.

Como as matrizes já estão fatoradas, temos uma equação secular $|GF - I\lambda| = 0$ para cada espécie de simetria A_1 e E. O seu grau é dado pelo número de modos normais para espécies A_1 e E e as raízes, λ_i relacionam-se com as frequências vibracionais, ν_i pela relação:

$$\lambda_i = 4\pi^2 \nu_i^2 \quad (29)$$

As coordenadas normais e as de simetria relacionam-se por meio da matriz de transformação L_S :

$$S = L_S Q \quad (30)$$

As expressões de energias cinética e potencial, em termos de coordenadas normais, podem ser escritas:

$$2T = Q^+ L_S^+ G_S^{-1} L_S Q \quad (31)$$

$$2T = Q^+ I Q \quad (32)$$

em que

$$L_S^+ G_S^{-1} L_S = I \quad (33)$$

$$L_S^+ = L_S^{-1} G_S$$

$$2V = Q^+ L_S^+ F_S L_S Q \quad (34)$$

$$2V = Q^+ \Lambda Q \quad (35)$$

em que

$$\Lambda = L_S^+ F_S L_S \quad (36)$$

As energias cinética e potencial podem ser expressas em termos de coordenadas normais Q_i :

$$2T = \sum_i Q_i^2 \quad (37)$$

$$2V = \sum_i \lambda_i Q_i^2 \quad (38)$$

As equações de movimento podem ser obtidas a partir das equações de Lagrange independentemente para cada coordenada Q_i .

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{Q}_i} \right) + \frac{\partial V}{\partial Q_i} = 0 \quad i = 1, 2, 3 \dots \quad (39)$$

Os programas chamados BEL, GEL, FEL e NCA, constituintes do pacote NCT (tratamento de coordenadas normais), permitem calcular os elementos das matrizes B, G^{-1} , F e, finalmente, as frequências vibracionais, distribuição de

energia potencial e constantes de força de ligação. A energia potencial é escrita em função de coordenadas internas, conforme a equação (12) e qualquer variação das ligações químicas e das deformações angulares refletem na alteração de distribuição de energia potencial da molécula. A percentagem de cada modo vibracional é calculada em relação ao número total de modos presentes em cada banda. O programa NCA fornece esses resultados em percentagem, na forma de DEP (distribuição de energia potencial para

cada modo de vibração).

A parte final do programa consiste em refinar os valores de constantes de força, comparando as frequências calculadas e experimentais observadas nos espectros infravermelhos.

4. RESULTADOS

As frequências vibracionais observadas, calculadas e DEP são apresentadas na Tabela 2.

Tabela 2 - Números de onda observados, calculados e distribuição de energia potencial

Espécie de simetria A1			
Numeração	Observados (cm ⁻¹)	Calculados (cm ⁻¹)	DEP (%)
ν_1	3021.0	3021.0	ν_{C-H} (95%)
ν_2	657.0	657.0	ν_{C-Cl} (100%)
ν_3	366.0	366.0	δ_{CCl_2} (11%), δ_{Cl-C-H} (79%)
Espécie de simetria E			
Numeração	Observados (cm ⁻¹)	Calculados (cm ⁻¹)	DEP (%)
ν_4	1212.0	1212.0	δ_{C-H} (100%)
ν_5	759.0	759.0	ν_{C-Cl} (30%), δ_{Cl-C-H} (66%)
ν_6	261.0	261.0	δ_{CCl_2} (96%)

Nota:	DEP	distribuição de energia potencial
	ν_{C-H}	estiramento da ligação C-H
	ν_{C-Cl}	estiramento da ligação C-Cl
	δ_{C-H}	deformação da ligação C-H
	δ_{Cl-C-H}	deformação angular Cl-C-H
	δ_{CCl_2}	deformação angular Cl-C-Cl
	ν_4, ν_5 e ν_6	são modos degenerados (espécie E)

Os modos normais vibracionais, para o clorofórmio, são mostrados na Fig. 3.

de constantes de força de ligação e as de interação refinadas.

Na Tabela 3, são apresentados valores

Tabela 3 - Constantes de força para a molécula de clorofórmio

Constante de estiramento		
Numeração	Constante de estiramento	Valor (md / Å ²)
k1	k_r	4.795
k2	k_{t_i}	6.311
Constante de deformação		
Numeração	Constante de deformação	Valor (md / Å ²)
k3	k_{α_i}	1.316
k4	k_{β_i}	0.265
Constante de interação		
Numeração	Constante de interação	Valor (md / Å ²)
k5	$k_{r_{t_i}}$	-1.099
k6	$k_{t_i t_j}$	-0.046
k7	$k_{r_{\alpha_i}}$	0.293
k8	$k_{r_{\beta_i}}$	0.300
k9	$k_{t_i \alpha_j}$	0.357
k10	$k_{t_i \beta_j}$	0.151
k11	$k_{t_i \alpha_j}$	-0.101
k12	$k_{t_i \beta_j}$	-0.108
k13	$k_{\alpha_i \alpha_j}$	0.240
k14	$k_{\beta_i \beta_j}$	0.004
k15	$k_{\alpha_i \beta_j}$	-0.020
k16	$k_{\alpha_i \beta_j}$	0.050

Os termos k_r e k_{t_i} indicam variação nos comprimentos de ligação r e t_i , respectivamente.

Os termos k_{α_i} e k_{β_i} indicam variações de ângulos α_i e β_i , respectivamente.

Os termos $k_{r_{t_i}}$, $k_{r_{\beta_i}}$ e $k_{\alpha_i \alpha_j}$ indicam interações entre r e t_i ; r e β_i ; α_i e α_j , respectivamente. Observamos que os valores de constantes de estiramento são sempre maiores em relação aos outros.

Muitas vezes, as constantes de interação não são disponíveis e somente as constantes de interação das frequências próximas dentro da matriz da função potencial são consideradas.

As frequências calculadas a partir das constantes de força encontradas na literatura (COLTHUP; DALY; WIBERLEY, 1990) foram comparadas às experimentais, ajustando valores de constantes de força de ligação. Os cálculos são repetidos até que os valores calculados se tornem iguais aos experimentais. As constantes de força, assim obtidas, foram apresentadas na Tabela 2.

Os resultados de distribuição de energia potencial mostram que os modos, 3021; 1217; 657 e 261 cm^{-1} são praticamente genuínos. No entanto, os modos em 759 e 366 cm^{-1} representam uma mistura de vários modos de vibração.

5. CONCLUSÃO

Os espectros infravermelhos em geral trazem informações completas da estrutura da molécula. No entanto, muitos efeitos surgem ao mesmo tempo; por exemplo: o aspecto das bandas devido à alteração na distribuição eletrônica, à mudança na conformação, e ao acoplamento dos modos, entre outros.

O tratamento matemático das coordenadas normais, para o clorofórmio com a simetria C_{3v} , foi feito com o uso do pacote de programas chamado NCT.

Muitas vezes, as atribuições das frequências dos espectros infravermelhos são feitas a partir dos compostos semelhantes que existem na literatura. Neste trabalho, as atribuições de frequências foram feitas baseadas na distribuição de energia potencial que é uma função da distorção de suas coordenadas internas. Os resultados mostraram que as bandas em 3021; 1217; 657 e 261 cm^{-1} representam, praticamente, modos genuínos ao passo que aquelas em 759 e 356 cm^{-1} , uma mistura de vários modos de vibrações.

AGRADECIMENTOS

Patrícia Marcondes dos Santos agradece a bolsa de estudo concedida pela Fundação Valeparaibana de Ensino - FVE.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BALL, D. W. Físico-Química. São Paulo: Thomson, 2005.
- BARBOSA, L. C. A. *Espectroscopia no Infravermelho na caracterização de compostos orgânicos*. Viçosa: UFV, 2007.
- COLTHUP, N. B.; DALY, L. H.; WIBERLEY, S. E. *Introduction to Infrared and Raman Spectroscopy*. 3.ed. New York: Academic Press, 1997.
- DIEM, M., GRIFFITHS, P. R.; CHALMERS, J. M. *Vibrational Spectroscopy for Medical Diagnosis*. Chichester: Wiley, 2008.
- HASE, Y. NCT: Pacote de Tratamento de Coordenadas Normais (Versão 7). *Química Nova*, v. 27, n. 4, p.664-67, 2004.
- LOPES, P. Clorofórmio. *Brasil Escola*. Disponível em: <http://www.brasilecola.com/drogas/clorofor mio.htm>. Acesso em: 13 jun. 2012.
- MANTSCH, H. H.; CHAPMAN, D. *Infrared Spectroscopy of Biomolecules*. New York: Wiley-Liss, 1996.
- SALA, O. *Fundamentos da espectroscopia Raman e no Infravermelho*. São Paulo: Editora UNESP, 1995.
- SILVERSTEIN, R. M.; WEBSTER, F. X.; KIEMLE, D. J. *Identificação espectrométrica de compostos orgânicos*. 7. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2007.
- STUART, B. H. *Biological Applications of Infrared Spectroscopy*. Chichester, New York, John Wiley & Sons, 1997.
- WILSON, E. B.; DECIUS, J. C.; CROSS, P. *Molecular Vibrations*. New York: McGraw-Hill, 1955.