

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE QUÍMICA
DEPARTAMENTO DE FÍSICO-QUÍMICA

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Aplicação do modelo carga-fluxo de carga-fluxo de dipolo para calcular e interpretar as intensidades no espectro infravermelho dos fluoroclorometanos

Mestrando: João Viçozo da Silva Júnior
Orientador: Prof. Dr. Roy Edward Bruns
Instituto de Química
Universidade Estadual de Campinas

Julho, 2006.

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA DO
INSTITUTO DE
QUÍMICA DA UNICAMP

○	
○	
○	Si38a
	Silva Júnior, João Viçozo. Aplicação do modelo carga-fluxo de carga-fluxo de dipolo para calcular e interpretar as intensidades no espectro infravermelho dos fluoroclorometanos / João Viçozo Silva Júnior. -- Campinas, SP: [s.n] , 2006.
○	
▪	Orientador: Roy Edward Bruns.
▪	
▪	Dissertação - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Química.
▪	
▪	1. Intensidades vibracionais. 2. CCFDF. 3. Distribuição eletrônica. 4. QTAIM. I. Bruns, Roy Edward. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Química. III. Título.

Título em inglês: Application of the charge-charge flux-dipole flux model to calculate and interpret the infrared intensities of the fluorochloroethanes

Palavras-chaves em inglês: Vibrational intensities, CCFDF, Electronic distribution, QTAIM

Área de concentração: Físico-Química

Titulação: Mestre em Química na Área de Físico-Química

Banca examinadora: Orientador: Roy Edward Bruns; Anselmo Elcana de Oliveira, Pedro Antonio Muniz Vazquez

Data de defesa: 12/07/2006

À minha avó Carolina.

AGRADECIMENTOS

- Ao Prof. Roy Edward Bruns, pela oportunidade que me deu em seu grupo de pesquisa, pela excelente orientação e também pela amizade.
- Ao Dr. Roberto L. A. Haiduke, pelo auxílio neste trabalho de pesquisa.
- Aos Profs. Nelson H. Morgon, Pedro A. M. Vazquez, Rogério Custodio, Yoshiyuki Hase, pelos cursos ministrados.
- À Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), pela bolsa concedida.
- A minha família, pelo apoio e carinho.
- Aos meus amigos.

CURRICULUM VITAE

1. Dados pessoais

Nome: João Viçozo da Silva Júnior

Sexo: Masculino Estado Civil: Solteiro

Nascimento: 11/02/1982

Endereço: Av. José Próspero Jacobucci Nº 290 Apto.:01

Parque das Universidades Campinas-SP

Fone:(19)3296-5360 e (19)9208-1243

e_mail: joaojr@iqm.unicamp.br

2. Formação Acadêmica

2000-2004 Universidade Estadual de Londrina (UEL)

Graduação em Química (Bacharelado – Tecnológica)

Londrina-PR, Brasil

2004-2006 Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)

Mestrado em Química (em andamento, bolsista FAPESP)

Campinas-SP, Brasil

3. Iniciação Científica

Título: Constituintes químicos das raízes de *Spathodea campanulata* e atividade antifúngica do caule de *Aspidosperma polyneuron*

Período: 06/2001 à 01/2004

Local: Universidade Estadual de Londrina

Bolsista: CNPq

4. Estágios

- 3/2001 - 5/2001 RESÍDUOS LABORATORIAIS NO ENSINO MÉDIO - DIAGNÓSTICO E DIRETRIZES PARA O FUTURO (Química Analítica - estágio voluntário - UEL)
- 5/2001 - 5/2002 ISOLAMENTO E PURIFICAÇÃO DE SUBSTÂNCIAS A PARTIR DE EXTRATOS VEGETAIS (Química Orgânica - estágio voluntário - UEL)
- 8/2002 - 7/2003 CONSTITUINTES ANTIOXIDANTES DAS RAÍZES DE *Spathodea campanulata* (Química Orgânica - estágio remunerado com bolsa "IC-UEL" - UEL)
- 7/2003 - 1/2004 ESTÁGIO SUPERVISIONADO EM QUÍMICA "A" (INVESTIGAÇÃO QUÍMICA DE *Aspidosperma polyneuron*) (Química Orgânica - estágio remunerado com bolsa "P.I.B.I.C/CNPq/UEL" - UEL)

5. Publicações Técnicas e Científicas

- 1) Viçozo J. S. Jr.; César, P. H.; Faria, S. H. D. M.; Haiduke, R. L. A.; Bruns, R. E. "A charge-charge flux-dipole flux decomposition of the dipole moment derivatives and infrared intensities of the AB₃ (A=N, P; B=H, F) molecules" *Chem. Phys.* **2005**, *317*, 35.
- 2) Viçozo, J. S. Jr.; Haiduke, R. L. A.; Bruns, R. E. "QTAIM charge-charge flux-dipole flux models for the infrared fundamental intensities of the fluorochloromethanes" *J. Phys. Chem. A* **2006**, *110*, 4839.

RESUMO

Título: Aplicação do modelo carga-fluxo de carga-fluxo de dipolo para calcular e interpretar as intensidades no espectro infravermelho dos fluoroclorometanos

Autor: João Viçozo da Silva Júnior

Orientador: Roy Edward Bruns

Palavras-chave: intensidades vibracionais, CCFDF, distribuição eletrônica, QTAIM

O momento dipolar molecular, suas derivadas e as intensidades fundamentais no espectro infravermelho dos fluoroclorometanos são determinados a partir de cargas e dipolos atômicos QTAIM, e de seus fluxos no nível MP2/6-311++G(3d,3p). A comparação dos momentos dipolares e das intensidades fundamentais no infravermelho calculados usando parâmetros QTAIM com aqueles obtidos diretamente a partir de cálculos MP2/6-311++G(3d,3p) mostra erros rms (root mean square) de 0,01 D e 5,6 km mol⁻¹, e erros de 0,04 D e 23,1 km mol⁻¹ quando comparados com valores experimentais. As contribuições de carga, fluxo de carga e fluxo de dipolo são calculadas para todos os modos normais de vibração destas moléculas. Uma correlação negativa significativa (-0,92) é observada entre as contribuições de fluxo de carga e de fluxo de dipolo e indica que a transferência de carga de um lado para outro da molécula durante as vibrações é acompanhada por uma relaxação da densidade eletrônica que se polariza na direção oposta. Os modos normais de estiramento CF, CCl e CH destas moléculas mostram ter conjuntos de valores característicos de contribuições de carga, fluxo de carga e fluxo de dipolo. Embora as deformações FCF e ClCCl também possam ser diferenciadas umas das outras a partir dos tamanhos e sinais destas contribuições, algumas deformações HCH têm contribuições que são parecidas com aquelas das deformações ClCCl.

ABSTRACT

Title: Application of the Charge-Charge Flux-Dipole Flux model to calculate and interpret the infrared intensities of the fluorochloromethanes

Author: João Viçozo da Silva Júnior

Thesis Advisor: Roy Edward Bruns

Key words: vibrational intensities, CCFDF, electronic distribution, QTAIM

The molecular dipole moments, their derivatives and the fundamental infrared intensities of the fluorochloromethanes are determined from QTAIM atomic charges and dipoles and their fluxes at the MP2/6-311++G(3d,3p) level. Root-mean-square (rms) errors of 0.01 D and 5.6 km mol^{-1} are found for the dipole moments and fundamental infrared intensities calculated using QTAIM parameters when compared with those obtained directly from the MP2/6-311++(3d,3p) calculations and 0.04 D and 23.1 km mol^{-1} when compared to the experimental values. Charge, charge flux and dipole flux contributions are calculated for all the normal vibrations of these molecules. A large negative correlation coefficient of -0.92 is calculated between the charge flux and dipole flux contributions and indicates that charge transfer from one side of the molecule to the other during vibrations is accompanied by relaxation with electron density polarization in the opposite direction. The CF, CCl and CH stretching normal modes of these molecules are shown to have characteristic sets of charge, charge flux and dipole flux contributions. Although the FCF and ClCCl deformation normal modes can also be discriminated from one another based on their sizes and signs of these contributions some HCH deformations have contributions that are similar to those for some of the ClCCl deformations.

GLOSSÁRIO

Siglas

CCFDF = modelo Carga-Fluxo de Carga-Fluxo de Dipolo

DFT = Teoria do Funcional de Densidade

MP2 = método de correlação eletrônica Moller-Plesset 2

QTAIM = Teoria Quântica dos Átomos em Moléculas

rms = erro quadrático médio

u.a.= unidade atômica

ÍNDICE

1. Introdução.....	1
2. Objetivos.....	4
3. Metodologia.....	6
3.1 Teoria, cargas e dipolos QTAIM.....	6
3.2 Momento dipolar molecular.....	9
3.3 O modelo Carga-Fluxo de Carga-Fluxo de Dipolo em coordenadas Cartesianas	10
3.4 Cálculo das derivadas que constituem as contribuições de fluxo de carga e fluxo de dipolo do modelo CCFDF utilizando cargas e dipolos QTAIM.....	12
3.5 Conversão das derivadas do momento dipolar de coordenadas Cartesianas para coordenadas normais e o cálculo de intensidades vibracionais.....	14
3.6 Interpretação física das contribuições de carga, fluxo de carga e fluxo de dipolo do modelo CCFDF.....	15
4. Cálculos.....	17
5. Resultados e Discussões.....	19
5.1 Ângulos e comprimentos de ligação.....	19
5.2 Cargas atômicas, dipolos atômicos e momento dipolar molecular.....	20
5.3 Intensidades fundamentais no infravermelho.....	22
5.4 Interpretação das intensidades no IV em termos das contribuições de carga, fluxo de carga, e fluxo de dipolo para as derivadas do momento dipolar.....	25
6. Conclusões.....	35
7. Estudos Futuros.....	37
8. Referências.....	38
Anexo	41

1. Introdução

A estrutura eletrônica tem sido, durante muito tempo, alvo de pesquisas de muitos químicos e físicos que visam compreender melhor a maneira como os elétrons estão distribuídos em moléculas. Nesse contexto, vários métodos teóricos foram propostos para calcular cargas atômicas a partir de funções de onda moleculares com a finalidade de reduzir a informação sobre as distribuições eletrônicas em moléculas a parâmetros atômicos mais simples. Porém, as grandes dificuldades associadas a esse tipo de estudo, como por exemplo, a inexistência de dados experimentais de cargas atômicas, faz com que esses métodos sejam considerados arbitrários, ou seja, dividem a opinião dos cientistas sobre qual seria o mais adequado para representar as distribuições eletrônicas em moléculas.

A falta de um modelo eficaz para descrever a distribuição eletrônica causa grandes dificuldades para interpretar os fenômenos eletrônicos sobre os quais estão fundamentadas muitas técnicas de espectroscopia molecular. Um bom exemplo é a espectroscopia na região do infravermelho, cujas intensidades das bandas que constituem o espectro de moléculas são de difícil interpretação, devido ao desconhecimento do comportamento da estrutura eletrônica durante as vibrações moleculares.

Porém, as intensidades do espectro infravermelho de moléculas podem agora ser investigadas através do modelo Carga-Fluxo de Carga-Fluxo de Dipolo (CCFDF - Charge-Charge Flux-Dipole Flux).¹⁻³ Este modelo utiliza cargas e dipolos atômicos obtidos através da Teoria Quântica Átomos em Moléculas (QTAIM - Quantum Theory Atoms In Molecules)⁴ para decompor as derivadas do momento dipolar molecular em três contribuições muito simples de serem interpretadas fisicamente.

A simplicidade da interpretação de suas três contribuições completamente clássicas faz deste modelo uma ferramenta com grande potencial para se estudar a distribuição de cargas eletrônicas durante vibrações moleculares. Trata-se de um modelo mais poderoso do que o modelo Carga-Fluxo de Carga-Overlap (CCFO – Charge-Charge Flux-Overlap),⁵ o qual possui 2 contribuições clássicas e uma terceira, Overlap, que não possui uma interpretação simples.

Nosso grupo de pesquisa desenvolveu e tem utilizado com sucesso o modelo CCFDF/QTAIM para estudar moléculas lineares.¹ Um dos principais resultados obtidos foi a observação de que a contribuição fluxo de carga é negativamente correlacionada com a contribuição fluxo de dipolo. A interpretação para esta relação é que a transferência de carga eletrônica entre átomos num dado sentido da molécula é acompanhada por uma polarização da densidade eletrônica molecular no sentido oposto.

No presente trabalho, este modelo foi utilizado para investigar a estrutura eletrônica dos fluoroclorometanos (CH_xF_y , CH_xCl_y and CF_xCl_y , sendo $x = 0,1,\dots,4$ e $y = 4 - x$) através das intensidades no espectro infravermelho dessas moléculas. A escolha dessas moléculas se deve primeiro ao fato de que a movimentação dos átomos de carbono e de flúor, que possuem cargas elevadas nesses sistemas químicos, pode induzir grandes efeitos de polarização nos átomos de cloro, que possuem nuvens eletrônicas de grande volume, e segundo porque esse grupo de

moléculas possui dados experimentais completos de intensidades no infravermelho em fase gasosa.

2. Objetivos

O objetivo deste trabalho foi avaliar o potencial do modelo CCFDF utilizando parâmetros QTAIM para descrever o comportamento da estrutura eletrônica dos fluoroclorometanos durante seus movimentos vibracionais e, conseqüentemente, obter informações sobre as propriedades desses sistemas químicos.

Na primeira etapa, buscou-se verificar a eficácia desse modelo para reproduzir as intensidades vibracionais destas moléculas. Uma vez que se observou uma boa concordância entre as intensidades calculadas e as experimentais, teve-se um forte indicativo de que as alterações das distribuições eletrônicas durante as vibrações moleculares foram descritas adequadamente pelo modelo. Esses resultados encorajaram o desenvolvimento de duas novas etapas, nas quais foram propostas interpretações físicas para os fenômenos observados nas estruturas eletrônicas durante tais vibrações.

A etapa subsequente teve o objetivo de observar se a correlação negativa entre as contribuições de fluxo de carga e de fluxo de dipolo, que foi observada para as moléculas de um estudo anterior,¹ também ocorre para os fluoroclorometanos. Esse fenômeno é uma informação importante sobre o

comportamento da estrutura eletrônica durante vibrações moleculares, principalmente se não for restrito à apenas a alguns grupos de moléculas.

E na última etapa, o interesse foi verificar a possibilidade de identificar os movimentos vibracionais dessas moléculas em termos de valores característicos das contribuições de carga, fluxo de carga e fluxo de dipolo.

3. Metodologia

3.1 Teoria, cargas e dipolos QTAIM

A teoria QTAIM,^{4,6-8} desenvolvida por Bader e colaboradores, é uma poderosa extensão da mecânica quântica que propõe uma maneira de se definir átomos em moléculas e de se calcular as propriedades moleculares somando-se as contribuições de cada átomo para esta propriedade.

Segundo esta teoria, os limites espaciais de um átomo na molécula são definidos em termos de características topológicas da densidade eletrônica molecular. Esta densidade ($\rho(r)$) é o veículo de expressão desta teoria e representa a probabilidade de se encontrar qualquer um dos N elétrons de uma molécula em um volume infinitesimal em torno de um ponto do espaço molecular.

A densidade eletrônica é geralmente representada em desenhos ilustrativos por linhas de contorno, conforme mostra a *Figura 1*, onde cada dessas linhas representa uma região do espaço molecular onde a densidade é constante. Uma vez que esta densidade é uma grandeza escalar, ou seja, a cada ponto espacial está associado um valor, a sua análise pode ser complicada, sobretudo em três dimensões. Neste sentido, é conveniente se tomar a sua primeira derivada, a qual é

chamada de campo vetor gradiente ($\nabla\rho(r)$). Agora, cada ponto do espaço molecular está associado a um valor e a uma direção, de maneira a criar uma estrutura topológica mais simples de ser interpretada, conforme mostra a *Figura 2*. Os pontos em que esta derivada é nula são chamados de pontos críticos (mínimo, máximo e sela) e são importantes na identificação das características topológicas da densidade eletrônica de uma molécula.

O limite externo de um átomo na molécula é por definição a linha de contorno cuja densidade eletrônica é 0,001 ua. Adotando este critério, geralmente se garante que mais do que 99% da densidade eletrônica está incluída no volume atribuído ao átomo. Já o limite interno são as superfícies de fluxo zero, as quais são regiões do espaço molecular tangenciadas pelas linhas do campo vetor gradiente, conforme pode se observar na *Figura 2*.

Após se definir o volume de um átomo na molécula, deve-se integrar a densidade eletrônica sobre o mesmo utilizando o operador adequado para se obter uma determinada propriedade química. Neste trabalho utilizamos as cargas e os dipolos atômicos calculados através desta teoria.

A carga (q) do átomo i é obtida da diferença entre a carga nuclear (Z_i) e a carga associada à densidade eletrônica, a qual é calculada integrando-se a densidade eletrônica sobre o volume atômico.

$$q_i = Z_i - \int_i \rho(r) d\tau \quad (1)$$

As cargas atômicas obtidas através dessa teoria possuem dois atributos muito importantes a ser consideradas no cálculo dessas quantidades. A primeira, é que a soma das cargas de todos os átomos de uma molécula neutra é nula. A segunda, é que a densidade eletrônica a ser utilizada pode ser obtida tanto por cálculos ab

início e DFT como experimentalmente por difração eletrônica ou por cristalografia de Raio-X.

Uma vez que a distribuição eletrônica não é esfero-simétrica, as cargas negativas estão centradas em um ponto que difere do núcleo, o que implica em um dipolo no átomo. Neste sentido, o momento dipolar do átomo i é obtido integrando-se o produto da densidade eletrônica por um vetor (r_i) centrado no núcleo deste átomo.

$$m_{i,r} = -e \int_i r_i \rho(r) d\tau \quad (2)$$

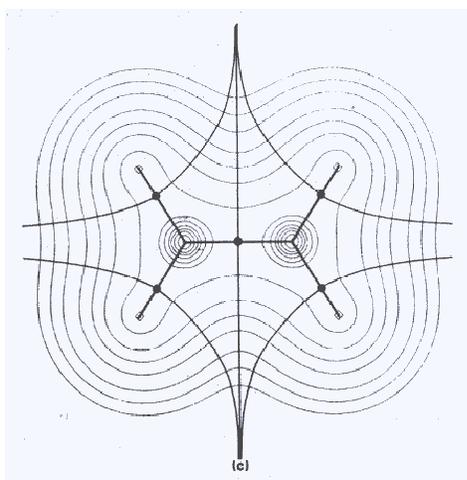


Figura 1 – Mapa de contorno para o etileno.

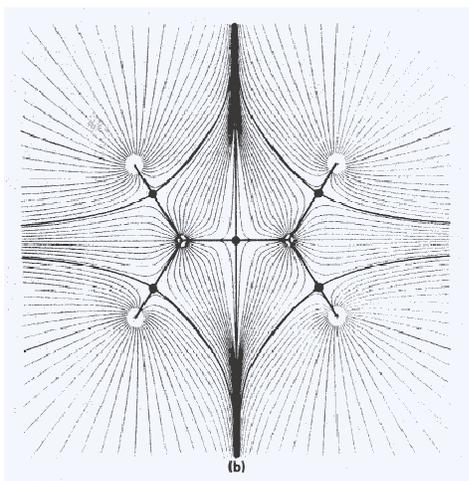


Figura 2 – Campo vetor gradiente (bidimensional) e superfícies de fluxo zero para o etileno.

3.2 Momento dipolar molecular

Neste trabalho, o momento dipolar molecular é calculado utilizando cargas e dipolos atômicos QTAIM. A importância de se usar dipolos atômicos, e não somente cargas, é considerar não só a distribuição de cargas atômicas na molécula, mas também a assimetria da distribuição eletrônica em torno dos núcleos dos átomos.

As componentes Cartesianas do momento dipolar molecular podem ser representadas por⁷

$$p_r = \sum_i q_i r_i + \sum_i m_{i,r}, \quad (3)$$

onde r_i é o valor da coordenada Cartesiana r do i -ésimo átomo na molécula e q_i e $m_{i,r}$ são, respectivamente, a carga e o dipolo do átomo.

O primeiro termo dessa equação é a contribuição das cargas atômicas para o momento dipolar molecular e é calculado somando-se os produtos do vetor posição de cada átomo pela sua carga. O segundo termo é a contribuição dos dipolos atômicos para o momento dipolar molecular e é calculado somando-se os dipolos dos átomos da molécula.

3.3 O modelo Carga-Fluxo de Carga-Fluxo de Dipolo em coordenadas Cartesianas

Uma vez que se está interessado na alteração da estrutura eletrônica, é conveniente se tomar a primeira derivada do momento dipolar molecular. Derivando-se uma determinada componente Cartesiana do momento dipolar molecular com relação ao deslocamento de um dado átomo α em uma dada direção do sistema Cartesiano de coordenadas, obtêm-se as equações,

$$p_{xx}^{(\alpha)} = \frac{\partial p_x}{\partial x_\alpha} = q_\alpha + \sum_i x_i \frac{\partial q_i}{\partial x_\alpha} + \sum_i \frac{\partial m_{i,x}}{\partial x_\alpha}, \quad (4)$$

e

$$p_{yx}^{(\alpha)} = \frac{\partial p_y}{\partial x_\alpha} = \sum_i y_i \frac{\partial q_i}{\partial x_\alpha} + \sum_i \frac{\partial m_{i,y}}{\partial x_\alpha}. \quad (5)$$

A equação 4, que representa a variação da componente x do momento dipolar molecular quando se desloca o átomo α na mesma direção do sistema Cartesiano de coordenadas, é composta por três termos denominados respectivamente de, carga, fluxo de carga e fluxo de dipolo. A equação 5, que representa a variação da componente y do momento dipolar molecular quando se desloca o átomo α na direção x do sistema Cartesiano de coordenadas é composta, por dois termos denominados respectivamente de, fluxo de carga e fluxo de dipolo.

Derivando-se cada componente Cartesiana do momento dipolar em relação aos deslocamentos do átomo α nas três possíveis direções do sistema Cartesiano, se obtêm o tensor polar atômico deste átomo, o qual é representado pela matriz abaixo. Este tensor possui a informação de como a estrutura eletrônica molecular se altera quando um determinado átomo da molécula se desloca em relação à sua posição de equilíbrio.

$$\mathbf{P}_X^{(\alpha)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial p_x}{\partial x_\alpha} & \frac{\partial p_x}{\partial y_\alpha} & \frac{\partial p_x}{\partial z_\alpha} \\ \frac{\partial p_y}{\partial x_\alpha} & \frac{\partial p_y}{\partial y_\alpha} & \frac{\partial p_y}{\partial z_\alpha} \\ \frac{\partial p_z}{\partial x_\alpha} & \frac{\partial p_z}{\partial y_\alpha} & \frac{\partial p_z}{\partial z_\alpha} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_{xx}^{(\alpha)} & P_{xy}^{(\alpha)} & P_{xz}^{(\alpha)} \\ P_{yx}^{(\alpha)} & P_{yy}^{(\alpha)} & P_{yz}^{(\alpha)} \\ P_{zx}^{(\alpha)} & P_{zy}^{(\alpha)} & P_{zz}^{(\alpha)} \end{pmatrix} \quad (6)$$

Cada elemento da matriz acima pode ser decomposto nas contribuições de carga, fluxo de carga e fluxo de dipolo do modelo CCFDF, conforme foi observado nas equações 4 e 5. Assim, o tensor polar atômico é decomposto em três matrizes e é dado por

$$\mathbf{P}_X^{(a)} = \begin{pmatrix} q_\alpha & 0 & 0 \\ 0 & q_\alpha & 0 \\ 0 & 0 & q_\alpha \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sum x_i \frac{\partial q_i}{\partial x_\alpha} & \sum x_i \frac{\partial q_i}{\partial y_\alpha} & \sum x_i \frac{\partial q_i}{\partial z_\alpha} \\ \sum y_i \frac{\partial q_i}{\partial x_\alpha} & \sum y_i \frac{\partial q_i}{\partial y_\alpha} & \sum y_i \frac{\partial q_i}{\partial z_\alpha} \\ \sum z_i \frac{\partial q_i}{\partial x_\alpha} & \sum z_i \frac{\partial q_i}{\partial y_\alpha} & \sum z_i \frac{\partial q_i}{\partial z_\alpha} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sum \frac{\partial m_{i,x}}{\partial x_\alpha} & \sum \frac{\partial m_{i,x}}{\partial y_\alpha} & \sum \frac{\partial m_{i,x}}{\partial z_\alpha} \\ \sum \frac{\partial m_{i,y}}{\partial x_\alpha} & \sum \frac{\partial m_{i,y}}{\partial y_\alpha} & \sum \frac{\partial m_{i,y}}{\partial z_\alpha} \\ \sum \frac{\partial m_{i,z}}{\partial x_\alpha} & \sum \frac{\partial m_{i,z}}{\partial y_\alpha} & \sum \frac{\partial m_{i,z}}{\partial z_\alpha} \end{pmatrix}, \quad (7)$$

onde cada uma delas representa uma das três contribuições do modelo CCFDF.

O tensor polar molecular é a justaposição dos tensores polares atômicos^{9,10} e contém a informação de como a estrutura eletrônica molecular se modifica durante os movimentos vibracionais de todos os átomos que constituem a molécula. Este tensor é dado por

$$\mathbf{P}_X = \{\mathbf{P}_X^{(1)} \mathbf{P}_X^{(2)}, \dots, \mathbf{P}_X^{(N)}\}, \quad (8)$$

onde N é o número de átomos na molécula. Usando a *equação 7* o tensor polar molecular também pode ser reescrito em termos das três contribuições do modelo CCFDF, conforme a equação abaixo,

$$\mathbf{P}_X = \mathbf{P}_X^{(C)} + \mathbf{P}_X^{(CF)} + \mathbf{P}_X^{(DF)}. \quad (9)$$

3.4 Cálculo das derivadas que constituem as contribuições de fluxo de carga e fluxo de dipolo do modelo CCFDF utilizando cargas e dipolos QTAIM

A contribuição fluxo de carga possui a derivada da carga de cada átomo i da molécula em relação ao deslocamento de um determinado átomo α ao longo de cada eixo Cartesiano (r), conforme pode ser observado nas equações 4 e 5. Esta derivada foi calculada numericamente através da equação

$$\frac{\partial q_i}{\partial r_\alpha} = \frac{q_i^{(+)} - q_i^{(-)}}{2\Delta r_\alpha}, \quad (10)$$

onde q_i^{eq} , q_i^+ e q_i^- são respectivamente, a carga do átomo i no equilíbrio, a carga deste átomo após o deslocamento do átomo α na direção positiva de r (x , y , z) e após o deslocamento na direção negativa de r . Este deslocamento do átomo α em ambos sentidos de cada eixo Cartesiana em relação à sua posição de equilíbrio é realizado para simular o movimento vibracional deste átomo na molécula. Esta derivada é uma medida da alteração da carga em cada átomo i provocado pelo movimento do átomo α a partir de sua posição de equilíbrio.

De maneira análoga, a derivada que constitui a contribuição fluxo de dipolo foi calculada numericamente através da equação

$$\frac{\partial m_{i,r}}{\partial r_\alpha} = \frac{m_{i,r}^{(+)} - m_{i,r}^{(-)}}{2\Delta r_\alpha}, \quad (11)$$

onde $m_{i,r}^{eq}$, $m_{i,r}^+$ e $m_{i,r}^-$ são respectivamente a componente r do momento dipolar do átomo i no equilíbrio, após o deslocamento do átomo α na direção positiva de r e após o deslocamento na direção negativa de r . Esta derivada é uma medida da alteração do momento dipolar, ou seja da assimetria da distribuição eletrônica, em

cada átomo i provocado pelo movimento do átomo α a partir de sua posição de equilíbrio.

3.5 Conversão das derivadas do momento dipolar de coordenadas Cartesianas para coordenadas normais e o cálculo de intensidades vibracionais

O tensor polar molecular em coordenadas Cartesianas pode ser escrito em coordenadas normais usando a equação

$$\mathbf{P}_Q = \mathbf{P}_X \mathbf{A} \mathbf{U} \mathbf{L}' = (\mathbf{P}_X^{(C)} + \mathbf{P}_X^{(CF)} + \mathbf{P}_X^{(DF)}) \mathbf{A} \mathbf{U} \mathbf{L}' , \quad (12)$$

onde \mathbf{P}_Q é o tensor polar molecular em coordenadas normais. A matriz \mathbf{A} faz a conversão de coordenadas Cartesianas para coordenadas internas, as quais são convertidas para coordenadas de simetria através da matriz \mathbf{U} . Estas últimas são convertidas para coordenadas normais através da matriz \mathbf{L}' .¹¹

O tensor polar molecular em coordenadas normais pode ser reescrito em termos das contribuições de carga, fluxo de carga e fluxo de dipolo

$$\mathbf{P}_Q = \mathbf{P}_Q^{(C)} + \mathbf{P}_Q^{(CF)} + \mathbf{P}_Q^{(DF)} . \quad (13)$$

Supondo que a vibração seja harmônica e que o momento dipolar seja uma função linear com respeito às pequenas distorções em relação à geometria de equilíbrio, a intensidade (A_i) está relacionada com a derivada do momento dipolar molecular com respeito à i -ésima coordenada normal (Q_i) por

$$A_i = \left(N_A \pi / 3c^2 \right) \left(\partial \bar{p} / \partial Q_i \right)^2 \quad i = 1, 2, \dots, 3N - 6, \quad (14)$$

sendo N_A e c , respectivamente, o número de Avogadro e a velocidade da luz.¹²

3.6 Interpretação física das contribuições de carga, fluxo de carga e fluxo de dipolo do modelo CCFDF

Durante muito tempo espectroscopistas utilizaram o modelo Carga-Fluxo de Carga-Overlap (CCFO)⁵ para obter informações sobre estrutura eletrônica através de tensores polares obtidos das intensidades no espectro infravermelho de moléculas. O tensor polar atômico é expresso como uma soma de três termos. Os dois primeiros são a carga e o fluxo de carga, os quais são atribuídos ao modelo clássico de cargas atômicas e apresentam interpretação física simples. O último termo é o overlap, o qual é considerado uma interferência quântica originada pela sobreposição do conjunto de funções de base utilizadas na descrição do sistema. Este termo possui valores significativos em relação aos termos clássicos, mas não apresenta uma interpretação física.

Neste sentido, o modelo CCFDF é uma evolução do modelo CCFO, pois todas as suas três contribuições são fisicamente simples de serem interpretadas. A primeira contribuição, denominada carga, se refere à alteração do momento dipolar provocada pela movimentação das cargas atômicas durante as vibrações moleculares. A segunda, chamada de fluxo de carga, diz respeito à alteração do momento dipolar causada pela transferência intramolecular de cargas atômicas durante as vibrações moleculares. E a última, denominada fluxo de dipolo, pode ser

interpretada pela contribuição das mudanças nas polarizações das densidades eletrônicas ao redor dos núcleos dos átomos enquanto eles vibram.

4. Cálculos

Primeiro, realizou-se cálculos de otimização de geometria para as moléculas deste estudo. Em seguida, as geometrias otimizadas foram utilizadas nos cálculos de frequência vibracional, cargas e dipolos QTAIM. Essas cargas e dipolos foram calculadas utilizando a metodologia QTAIM para as posições de equilíbrio dos átomos e também deslocando-os de 0,01 Å nos sentidos positivo e negativo de cada eixo Cartesiano. Os cálculos foram realizados em uma estação de trabalho (DEC ALPHA – DS20) utilizando o programa GAUSSIAN 98¹³ e o conjunto de funções de base 6-311++G(3d,3p) no nível Møller-Plesset 2 de correlação eletrônica. A escolha desse conjunto de funções de base e do método, para se realizar os cálculos desta investigação, é baseada em um trabalho anterior do nosso grupo de pesquisa.¹⁴ Nesse trabalho a soma das intensidades de 30 moléculas, dentre as quais estão incluídos os fluoroclorometanos, foram calculadas com diferentes métodos (HF, B3LYP e MP2) e com diferentes conjuntos de funções de base (6-31G(d,p) e 6-311++G(3d,3p)) utilizando os programas GAUSSIAN 94 e GAMESS-US. A escolha de se analisar a soma das intensidades vibracionais de uma molécula e não de seus valores individuais foi importante neste trabalho para se evitar as incertezas associadas à separação de bandas sobrepostas. Os resultados mostram que a melhor

convergência em relação aos valores experimentais é obtida quando os cálculos de intensidades analíticas são realizados no nível MP2/6-311++G(3d,3p).

As cargas e os dipolos atômicos, obtidos para as geometrias de equilíbrio e para as geometrias resultantes do deslocamento individual dos átomos da molécula, foram utilizados para se calcular os tensores polares e suas contribuições de carga, fluxo de carga e fluxo de dipolo, em termos de coordenadas Cartesianas utilizando as equações 4-10. Esses cálculos foram realizados em um programa (FORTRAN) desenvolvido em nosso laboratório.

A conversão das derivadas do momento dipolar molecular de coordenadas Cartesianas para coordenadas normais foi realizada utilizando outro programa (FORTRAN) desenvolvido em nosso laboratório. Para isto, foram utilizadas as coordenadas normais obtidas no cálculo de frequência vibracional realizado no GAUSSIAN.

Essas derivadas em termos de coordenadas normais foram utilizadas no cálculo das intensidades vibracionais CCFDF/QTAIM. Essas intensidades foram obtidas através de um programa (FORTRAN) escrito em nosso laboratório. O motivo do cálculo dessas quantidades é compará-las com as intensidades obtidas através do GAUSSIAN e com as intensidades medidas experimentalmente.

5. Resultados e Discussões

5.1 Ângulos e comprimentos de ligação

As *Tabelas 1-3* contêm os ângulos e os comprimentos de ligação dos fluoro, cloro e fluoroclorometanos calculados no nível MP2/6-311++G(3d,3p) através do GAUSSIAN e também os valores experimentais.¹⁵ A comparação destes valores mostra erros rms de 0,01 Å para os comprimentos das ligações C-F, C-Cl e C-H e erros de 0,91°, 0,24° e 1,60° para os ângulos de ligação FCF, HCH e ClCCl, respectivamente.

Tabela 1 – Ângulos e comprimentos de ligação calculados e experimentais para os fluorometanos.

Molécula	EXPERIMENTAL				MP2/6-311++G(3d,3p)			
	r _{C-F} (Å)	r _{C-H} (Å)	α _{FCF} (°)	α _{HCH} (°)	r _{C-F} (Å)	r _{C-H} (Å)	α _{FCF} (°)	α _{HCH} (°)
CH ₃ F	1,382	1,095	-----	110,5	1,393	1,086	-----	110,3
CH ₂ F ₂	1,357	1,093	108,3	113,7	1,363	1,085	108,4	113,8
CHF ₃	1,332	1,098	108,8	-----	1,339	1,083	108,4	-----
CF ₄	1,323	-----	109,5	-----	1,324	-----	109,5	-----

Tabela 2 – Ângulos e comprimentos de ligação calculados e experimentais para os clorometanos.

Molécula	EXPERIMENTAL				MP2/6-311++G(3d,3p)			
	r _{C-Cl} (Å)	r _{C-H} (Å)	α _{CICCl} (°)	α _{HCH} (°)	r _{C-Cl} (Å)	r _{C-H} (Å)	α _{CICCl} (°)	α _{HCH} (°)
CH ₃ Cl	1,785	1,090	-----	110,8	1,780	1,083	-----	110,5
CH ₂ Cl ₂	1,765	1,087	112,0	111,5	1,767	1,080	112,5	111,8
CHCl ₃	1,758	1,100	111,3	-----	1,763	1,079	111,0	-----
CCl ₄	1,767	-----	109,5	-----	1,768	-----	109,5	-----

Tabela 3 – Ângulos e comprimentos de ligação calculados e experimentais para os fluoroclorometanos.

Molécula	EXPERIMENTAL				MP2/6-311++G(3d,3p)			
	r _{C-F} (Å)	r _{C-Cl} (Å)	α _{FCF} (°)	α _{CICCl} (°)	r _{C-F} (Å)	r _{C-Cl} (Å)	α _{FCF} (°)	α _{CICCl} (°)
CClF ₃	1,33	1,75	108,6	-----	1,33	1,75	108,5	-----
CCl ₂ F ₂	1,34	1,78	109,5	108,5	1,34	1,75	107,5	112,0
CCl ₃ F	1,36	1,75	-----	111,0	1,35	1,76	-----	110,6

5.2 Cargas atômicas, dipolos atômicos e momento dipolar molecular

As cargas e dipolos dos átomos que constituem os fluoro, cloro e fluoroclorometanos calculados utilizando a teoria QTAIM são apresentados na Tabela 4. Estes dados foram aplicados na equação 3 para se calcular o momento dipolar destas moléculas, os quais são mostrados na Tabela 5 e comparados com os valores experimentais encontrados na literatura¹⁵ e também com aqueles obtidos diretamente do GAUSSIAN no nível MP2/6-311++G(3d,3p). A análise das três últimas colunas desta tabela mostra que os momentos dipolares calculados utilizando as cargas e os dipolos QTAIM apresentam boa concordância com os momentos dipolares experimentais (erro rms = 0,04 D) e uma excelente concordância com aqueles obtidos diretamente da função de onda, uma vez que o erro rms calculado foi menor que 0,01 D. Foi observado também, que o momento dipolar molecular QTAIM possui contribuições significativas tanto das cargas

atômicas quanto dos dipolos atômicos, o que pode ser visto nas segunda e terceira colunas da *Tabela 5*.

Estes resultados mostram a importância de se considerar tanto cargas como dipolos atômicos no cálculo do momento dipolar molecular, bem como a eficácia dos parâmetros QTAIM quando utilizados para se reproduzir essas quantidades.

Tabela 4 - MP2/6-311++G(3d,3p) cargas e dipolos QTAIM para os fluoro, cloro e fluoroclorometanos na geometria de equilíbrio em unidade de elétrons (e) e Debye (D), respectivamente.

<i>Molécula</i>	q_C	q_H	q_F	q_{Cl}	$m_{C,Z}$	$m_{Ha,Z}$	$m_{Hb,Z}$	$m_{Fa,Z}$	$m_{Fb,Z}$	$m_{Cla,Z}$	$m_{Clb,Z}$
CH ₄	0,09	-0,02	---	---	0,00	-0,35	0,12	---	---	---	---
CH ₃ F	0,64	0,00	-0,65	---	1,52	0,15	---	0,43	---	---	---
CH ₂ F ₂	1,22	0,03	-0,64	---	1,93	0,20	---	0,37	---	---	---
CHF ₃	1,85	0,08	-0,64	---	-1,89	-0,28	---	-0,28	---	---	---
CF ₄	2,51	---	-0,63	---	0,00	---	---	0,76	-0,25	---	---
CH ₃ Cl	0,19	0,02	---	-0,25	0,42	0,16	---	---	---	-0,54	---
CH ₂ Cl ₂	0,27	0,06	---	-0,20	0,48	0,22	---	---	---	-0,17	---
CHCl ₃	0,34	0,10	---	-0,14	-0,41	0,05	---	---	---	-0,31	---
CCl ₄	0,40	---	---	-0,10	0,00	---	---	---	---	-0,56	0,19
CClF ₃	1,96	---	-0,62	-0,09	-1,54	---	---	-0,29	---	-0,45	---
CCl ₂ F ₂	1,42	---	-0,62	-0,10	1,77	---	---	0,43	---	0,28	---
CCl ₃ F	0,90	---	-0,61	-0,10	1,51	---	---	0,61	---	0,18	---

Tabela 5 - Momento dipolar MP2/6-311++G(3d,3p), QTAIM/MP2/6-311++G(3d,3p) e experimental para os fluoro, cloro e fluoroclorometanos em unidade de Debye (D).

<i>Molécula</i>	$p_q(QTAIM)^a$	$p_m(QTAIM)^b$	$p(QTAIM)$	$p(MP2/6-311++G(3p,3d))$	$ p(exp) $
CH ₄	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
CH ₃ F	-4,31	2,39	-1,92	-1,93	1,86
CH ₂ F ₂	-5,11	3,07	-2,04	-2,04	1,98
CHF ₃	4,72	-3,04	1,68	1,68	1,65
CF ₄	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
CH ₃ Cl	-2,27	0,34	-1,93	-1,93	1,89
CH ₂ Cl ₂	-2,20	0,57	-1,63	-1,63	1,60
CHCl ₃	1,62	-0,57	1,05	1,05	1,04
CCl ₄	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00

CCIF ₃	3,43	-2,87	0,56	0,56	0,50
CCl ₂ F ₂	-3,80	3,20	-0,60	-0,60	0,51
CCl ₃ F	-3,15	2,65	-0,50	-0,50	0,46

^a Contribuição das cargas atômicas para o momento dipolar molecular.

^b Contribuição dos dipolos atômicos para o momento dipolar molecular.

5.3 Intensidades de bandas fundamentais no espectro infravermelho

A *Tabela 6* mostra as intensidades de bandas no infravermelho calculadas utilizando a metodologia CCFDF/QTAIM, cujos valores são comparados com as intensidades experimentais obtidas na literatura¹⁶⁻³⁷ e com aquelas obtidas diretamente do GAUSSIAN no nível MP2/6-311++G(3d,3p), conforme ilustra o gráfico da *Figura 3*. A análise do gráfico e o pequeno valor obtido para o erro rms (5,6 km mol⁻¹) mostram uma ótima concordância entre as intensidades CCFDF/QTAIM e aquelas obtidas diretamente da função de onda MP2/6-311++G(3d,3p). As primeiras também apresentam boa concordância com as intensidades experimentais, o que pode ser visualizado no gráfico e que é reforçado pelo erro rms de 23,1 km mol⁻¹.

Estes resultados mostram a eficiência do modelo CCFDF para se estimar intensidades do espectro infravermelho dos fluoroclorometanos utilizando parâmetros QTAIM. Em outras palavras, significa dizer que este modelo reproduz de maneira adequada as alterações na distribuição de cargas eletrônicas durante as vibrações moleculares. Isto significa que as contribuições de carga, fluxo de carga e fluxo de dipolo podem ser utilizadas para se obter uma interpretação física dos fenômenos observados nas estruturas eletrônicas dos fluoroclorometanos durante seus movimentos vibracionais.

Tabela 6 - Intensidades experimentais, MP2/6-311++G(3d,3p) e CCFDF/QTAIM/MP2/6-311++G(3d,3p) no IV para os fluoro, cloro e fluoroclorometanos.

	<i>EXPERIMENTAL</i>	<i>MP2/6-311++G(3d,3p)</i>	<i>QTAIM</i>	<i>REFERÊNCIAS</i>	
CH₄					
i	$\nu_i(\text{cm}^{-1})$	$A_i (\text{km/mol})^a$	$A_i (\text{km/mol})$	$A_i (\text{km/mol})$	
3	3019	68,8	54,4	45,9	16, 17, 18
4	1311	34,2	30,8	28,8	16, 17, 18
CH₃F					
1	2910	31,1	32,0	57,0	19, 20
2	1460	2,2	1,6	0,0	19, 20
3	1049	101,7	103,7	86,7	19, 20
4	3006	49,2	46,2	51,6	19, 20
5	1468	7,4	9,0	8,5	19, 20
6	1182	2,2	2,7	4,2	19, 20
CH₂F₂					
1	2948	26,7	37,7	34,8	21, 22
2	1508	0,0	0,4	0,4	21, 22
3	1113	60,7	96,7	98,4	21, 22
4	529	4,9	4,8	4,6	21, 22
6	3014	41,6	23,7	20,6	21, 22
7	1178	4,5	15,9	16,3	21, 22
8	1435	10,5	12,8	12,6	21, 22
9	1090	269,1	252,4	252,4	21, 22
CHF₃					
1	3036	27,4	22,2	20,3	17, 23, 24, 25
2	1117	129	93,9	95,6	23
3	700	14,0	12,1	11,9	17, 23, 24, 25
4	1372	90	75,2	75,0	17, 23, 24, 25
5	1152	525,0	603,5	601,0	23,24
6	507	4,9	4,2	4,1	17, 23, 24, 25
CF₄					
3	1283	1259,9	1215,2	1194,9	17, 26
4	632	13,7	10,5	10,5	17, 26
CH₃Cl					
1	2930	18,9	22,4	20,4	20, 25, 27
2	1355	7,9	12,4	11,7	20, 25, 27
3	732	22,1	23,7	24,1	20, 25, 27
4	3006	9,7	5,5	3,8	20, 25, 27
5	1452	11,0	10,0	8,9	20, 25, 27
6	1017	4,1	4,5	4,0	20, 25, 27

CH₂Cl₂					
1	2997	6,9	4,9	3,6	28
2	1467	0,6	0,0	0,2	28
3	717	8,0	10,1	10,6	28
4	282	0,6	0,4	0,4	28
6	3055	0,0	0,6	1,2	28
7	898	1,2	1,4	1,0	28
8	1268	26,6	41,0	40,5	28
9	758	95,0	123,9	123,6	28
CHCl₃					
1	3034	0,3	1,6	2,0	29
2	681	4,4	3,0	3,3	29, 30
3	366	0,5	0,1	0,1	29
4	1221	30,8	44,0	40,6	29, 30
5	769	222,4	272,0	268,6	29, 30
6	258	0,1	0,0	0,0	29
CCl₄					
3	793	322,0	408,2	400,4	29
4	310	20,0	0,4	0,4	29
CClF₃					
1	1102	439,9	480,7	486,9	31, 32
2	783	31,5	23,2	20,6	31, 32
3	470	0,0	0,0	0,0	31, 32
4	1210	593,5	558,2	558,4	31, 32
5	560	3,3	2,1	2,4	31, 32
6	350	0,0	0,0	0,1	31, 32
CCl₂F₂					
1	1095	284,3	279,5	274,9	22, 33, 34
2	665	12,3	7,7	8,2	21
3	442	0,2	0,0	0,0	21
4	261	2,6	0,2	0,1	21
6	1152	183,3	192,0	191,5	22, 33, 34
7	475	0,1	0,0	0,1	24
8	915	324,8	375,3	381,7	22, 33, 34
9	432	0,1	0,0	0,0	21
CCl₃F					
1	1085	158,0	159,8	160,1	33, 35, 36, 37
2	539	1,1	0,9	1,2	35
3	347	0,3	0,4	0,8	35
4	846	388,3	465,1	445,6	33, 35, 36, 37
5	384	0,1	0,0	0,1	35

6	243	0,0	0,2	0,1	35
---	-----	-----	-----	-----	----

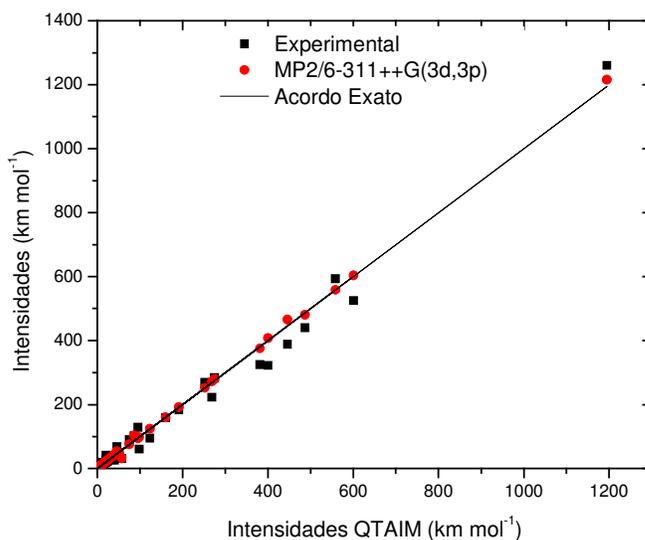


Figura 3 – Comparação das intensidades no IV obtidas a partir de QTAIM/CCFDF/MP2/6-311++G(3d,3p) com as intensidades obtidas diretamente da função de onda MP2/6-311++G(3d,3p) e com as experimentais.

5.4 Interpretação das intensidades no IV em termos das contribuições de carga, fluxo de carga, e fluxo de dipolo para as derivadas do momento dipolar

O estudo das derivadas do momento dipolar molecular através do modelo CCFDF/QTAIM pode ser realizado em termos de coordenadas Cartesianas ou em termos de coordenadas normais. Embora as contribuições de carga, fluxo de carga e fluxo de dipolo em termos de coordenadas Cartesianas sejam muito úteis para muitas aplicações, elas não têm uma relação direta com as intensidades no infravermelho. Neste sentido, as coordenadas normais são mais adequadas, pois

além de estarem diretamente relacionadas com as intensidades, apresentam uma descrição mais compacta em função de considerar propriedades de simetria das moléculas. Infelizmente, as incertezas nas coordenadas normais se misturam com as incertezas devido às aproximações associadas ao cálculo dos parâmetros QTAIM. Apesar desse problema, as coordenadas normais ainda são as mais adequadas, pois cada derivada do momento dipolar em termos dessas coordenadas está associada a um único dado experimental.

Apesar de não analisar as derivadas do momento dipolar em coordenadas Cartesianas neste trabalho, elas e também suas contribuições de carga, fluxo de carga e fluxo de dipolo são mostradas no final do texto (ANEXO).

As contribuições de carga (C), fluxo de carga (CF) e fluxo de dipolo (DF) para as derivadas do momento dipolar em termos de coordenadas normais, bem como seu valor total são apresentados na *Tabela 7*. A análise destas três contribuições mostra que qualquer uma delas pode ser a predominante, o que vai depender da molécula e do tipo de movimento vibracional. Outro fato relevante, é que para aproximadamente 80% dos movimentos vibracionais das moléculas estudadas, os sinais das contribuições de fluxo de carga são contrários aos sinais das contribuições de fluxo de dipolo. A *Figura 4*, na qual a contribuição de fluxo de carga é plotada contra a contribuição de fluxo de dipolo, mostra uma correlação negativa entre elas. O coeficiente de correlação é de -0,92. A interpretação física para essa observação é que uma transferência de carga para uma dada região da molécula (fluxo de carga) é acompanhada por uma relaxação da densidade eletrônica molecular, a qual se polariza (fluxo de dipolo) no sentido contrário. Essa compensação de carga eletrônica pode ser comparada ao efeito de doação-retrodoação de carga frequentemente utilizado para explicar a formação de complexos de metais de transição. A retrodoação de carga em um complexo envolve os orbitais mais externos, enquanto que a doação de carga ocorre nos

orbitais mais internos.³⁸ Para vibrações, a analogia é que o fluxo de dipolo envolve as partes mais polarizáveis da densidade eletrônica, enquanto que a transferência de carga ocorreria nas porções mais internas da densidade eletrônica.

Por outro lado, a contribuição de carga para a derivada do momento dipolar não é correlacionada com as duas contribuições de fluxo. Esta observação é confirmada através do cálculo de componentes principais, o qual mostra que 94% da variância dos dados da *Tabela 7* podem ser descritos em duas dimensões, sendo uma específica para a contribuição de carga e outra para a diferença entre as contribuições de fluxo de carga e de fluxo de dipolo.

Tabela 7 – Contribuições de carga, fluxo de carga e fluxo de dipolo para as derivadas do momento dipolar em termos de coordenadas normais para os fluoro, cloro e fluoroclorometanos em unidade de elétrons (e).

Molécula	Q _i	Vibração	$\frac{\partial p}{\partial Q_i}$			
			C	CF	DF	TOTAL
CH ₄	Q ₃	v _{CH}	-0,03	0,62	-0,73	-0,14
	Q ₄	δ _{HCH}	-0,03	-0,12	0,26	0,10
CH ₃ F	Q ₁	v _{CH}	-0,02	0,33	-0,54	-0,23
	Q ₂	δ _{HCH}	-0,05	-0,02	0,05	-0,02
	Q ₃	v _{CF}	-0,23	0,19	-0,26	-0,29
	Q ₄	v _{CH}	-0,05	0,57	-0,66	-0,14
	Q ₅	δ _{HCH}	-0,03	-0,12	0,23	0,07
	Q ₆		0,10	0,07	-0,12	0,05
CH ₂ F ₂	Q ₁	v _{CH}	-0,05	0,45	-0,59	-0,19
	Q ₂	δ _{HCH}	-0,07	-0,10	0,16	-0,02
	Q ₃	v _{CF}	-0,36	0,10	-0,07	-0,33
	Q ₄	δ _{FCF}	-0,17	-0,03	0,16	-0,05
	Q ₆	v _{CH}	-0,09	0,54	-0,61	-0,16
	Q ₇		0,23	0,10	-0,21	0,12
	Q ₈	δ _{HCH}	0,07	-0,02	0,07	0,12
	Q ₉	v _{CF}	-0,38	0,28	-0,42	-0,52
	CHF ₃	Q ₁	v _{CH}	-0,09	0,52	-0,59

	Q ₂	ν_{CF}	-0,52	0,00	0,21	-0,31
	Q ₃	δ_{FCF}	-0,28	-0,09	0,26	-0,10
	Q ₄	δ_{HCF}	-0,16	0,05	-0,09	-0,19
	Q ₅	ν_{CF}	-0,54	0,31	-0,33	-0,55
	Q ₆	δ_{FCF}	-0,17	-0,05	0,17	-0,05
CF ₄	Q ₃	ν_{CF}	-0,74	0,35	-0,24	-0,64
	Q ₄	δ_{FCF}	-0,23	-0,10	0,28	-0,05
CH ₃ Cl	Q ₁	ν_{CH}	0,00	0,23	-0,36	-0,14
	Q ₂	δ_{HCH}	-0,02	0,35	-0,21	0,12
	Q ₃	ν_{CCl}	-0,07	-0,10	0,02	-0,16
	Q ₄	ν_{CH}	0,00	0,64	-0,68	-0,03
	Q ₅	δ_{HCH}	0,00	0,10	-0,17	-0,07
	Q ₆		0,02	0,05	-0,10	-0,03
CH ₂ Cl ₂	Q ₁	ν_{CH}	0,03	0,42	-0,50	-0,05
	Q ₂	δ_{HCH}	0,05	-0,16	0,12	0,02
	Q ₃	ν_{CCl}	-0,10	-0,10	0,09	-0,12
	Q ₄	δ_{ClCCl}	-0,05	-0,02	0,03	-0,03
	Q ₆	ν_{CH}	0,03	0,64	-0,66	0,02
	Q ₇		0,02	0,10	-0,14	-0,02
	Q ₈	δ_{HCH}	0,05	-0,36	0,10	-0,21
	Q ₉	ν_{CCl}	-0,10	-0,28	0,02	-0,36
CHCl ₃	Q ₁	ν_{CH}	0,07	0,48	-0,50	0,05
	Q ₂	ν_{CCl}	-0,12	-0,05	0,12	-0,05
	Q ₃	δ_{ClCCl}	-0,05	-0,02	0,05	-0,02
	Q ₄	δ_{HCF}	-0,07	0,31	-0,09	0,16
	Q ₅	ν_{CCl}	-0,12	-0,33	0,07	-0,38
	Q ₆		0,03	0,00	-0,02	0,02
CCl ₄	Q ₃	ν_{CCl}	-0,12	-0,38	0,14	-0,36
	Q ₄	δ_{ClCCl}	-0,03	0,00	0,03	0,00
CClF ₃	Q ₁	ν_{CF}	-0,57	-0,31	0,17	-0,71
	Q ₂	ν_{CCl}	-0,21	-0,17	0,23	-0,16
	Q ₃	δ_{FCF}	-0,12	0,03	0,09	0,00
	Q ₄	ν_{CF}	-0,59	0,36	-0,31	-0,54
	Q ₅	δ_{FCF}	-0,17	-0,09	0,23	-0,03
	Q ₆	δ_{ClCF}	-0,03	-0,02	0,05	0,00
CCl ₂ F ₂	Q ₁	ν_{CF}	-0,43	-0,03	-0,07	-0,54
	Q ₂	ν_{CCl}	-0,14	-0,12	0,17	-0,09

	Q ₃	δ_{ClCCl}	-0,10	-0,05	0,16	0,00
	Q ₄	δ_{ClCCl}	0,02	-0,02	0,02	0,02
	Q ₆	ν_{CF}	-0,43	0,38	-0,40	-0,45
	Q ₇	δ_{FCF}	-0,09	0,02	0,09	0,02
	Q ₈	ν_{CCl}	-0,43	-0,52	0,33	-0,62
	Q ₉	δ_{FCF}	-0,14	0,03	0,09	-0,02
CCl ₃ F	Q ₁	ν_{CF}	-0,29	0,19	-0,31	-0,42
	Q ₂	ν_{CCl}	-0,03	-0,07	0,05	-0,05
	Q ₃	δ_{ClCCl}	-0,03	-0,03	0,09	0,02
	Q ₄	ν_{CCl}	-0,28	-0,45	0,24	-0,48
	Q ₅	δ_{FCCl}	-0,10	0,02	0,07	-0,02
	Q ₆	δ_{ClCCl}	0,02	-0,02	0,00	0,00

Alguns modos vibracionais não apresentam identificação, pois o movimento não pode ser classificado.

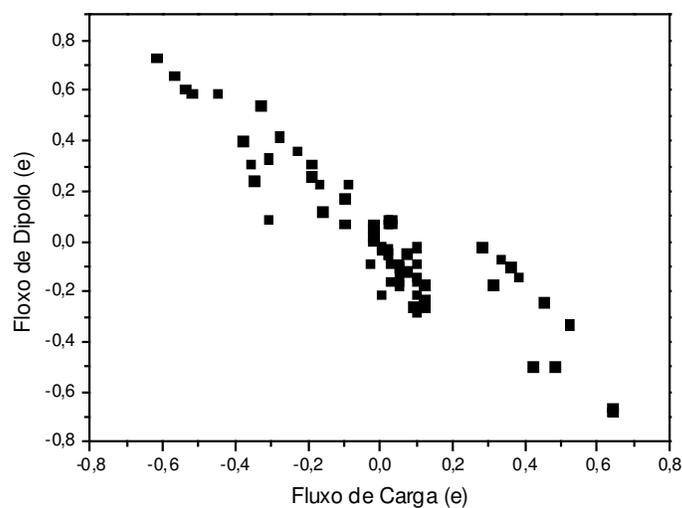
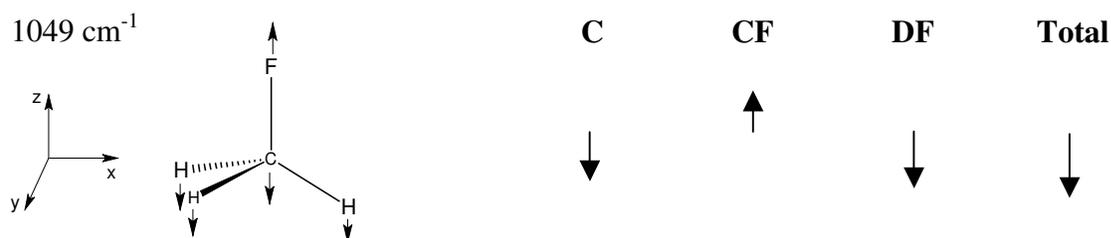


Figura 4 - Contribuição de fluxo de carga vs. fluxo de dipolo para as derivadas do momento dipolar em termos de coordenadas normais para os fluoroclorometanos.

Uma análise mais detalhada das contribuições de carga, fluxo de carga e fluxo de dipolo pode ser realizada para verificar se um determinado movimento vibracional pode ser identificado em todas as moléculas deste estudo através de valores ou intervalos de valores característicos para essas três contribuições do modelo CCFDF/QTAIM.

Estas contribuições têm sinais que dependem da orientação espacial das moléculas no eixo Cartesiano e também da fase de cada coordenada normal. A primeira destas duas informações pode ser visualizada na *Figura 5* para moléculas do grupo de simetria C_{3v} , as quais foram escolhidas como referência. As moléculas dos demais grupos de simetria (C_{2v} e T_d) assim como as C_{3v} estão dispostas no eixo cartesiano de maneira que o principal eixo de simetria coincida com o eixo Cartesiano z . No que diz respeito às fases das coordenadas normais escolheu-se como referência os estiramentos e as deformações em que as ligações estão aumentando seu tamanho em relação a posição de equilíbrio e em que os ângulos entre os átomos envolvidos na deformação também estão aumentando em relação ao equilíbrio, conforme a *Figura 5*. Além de que os átomos terminais envolvidos nos mesmos estiramentos e deformações se deslocam no sentido positivo dos eixos Cartesianos.

A análise dos movimentos vibracionais em termos das três contribuições do modelo CCFDF/QTAIM poderia ser realizada utilizando gráficos tridimensionais. Porém, uma vez que o fluxo de carga e o fluxo de dipolo são intercorrelacionados (correlação negativa), eles possuem praticamente a mesma informação e gráficos bidimensionais envolvendo a contribuição de carga em um dos eixos e qualquer uma das contribuições de fluxo no outro são suficientes para a análise.



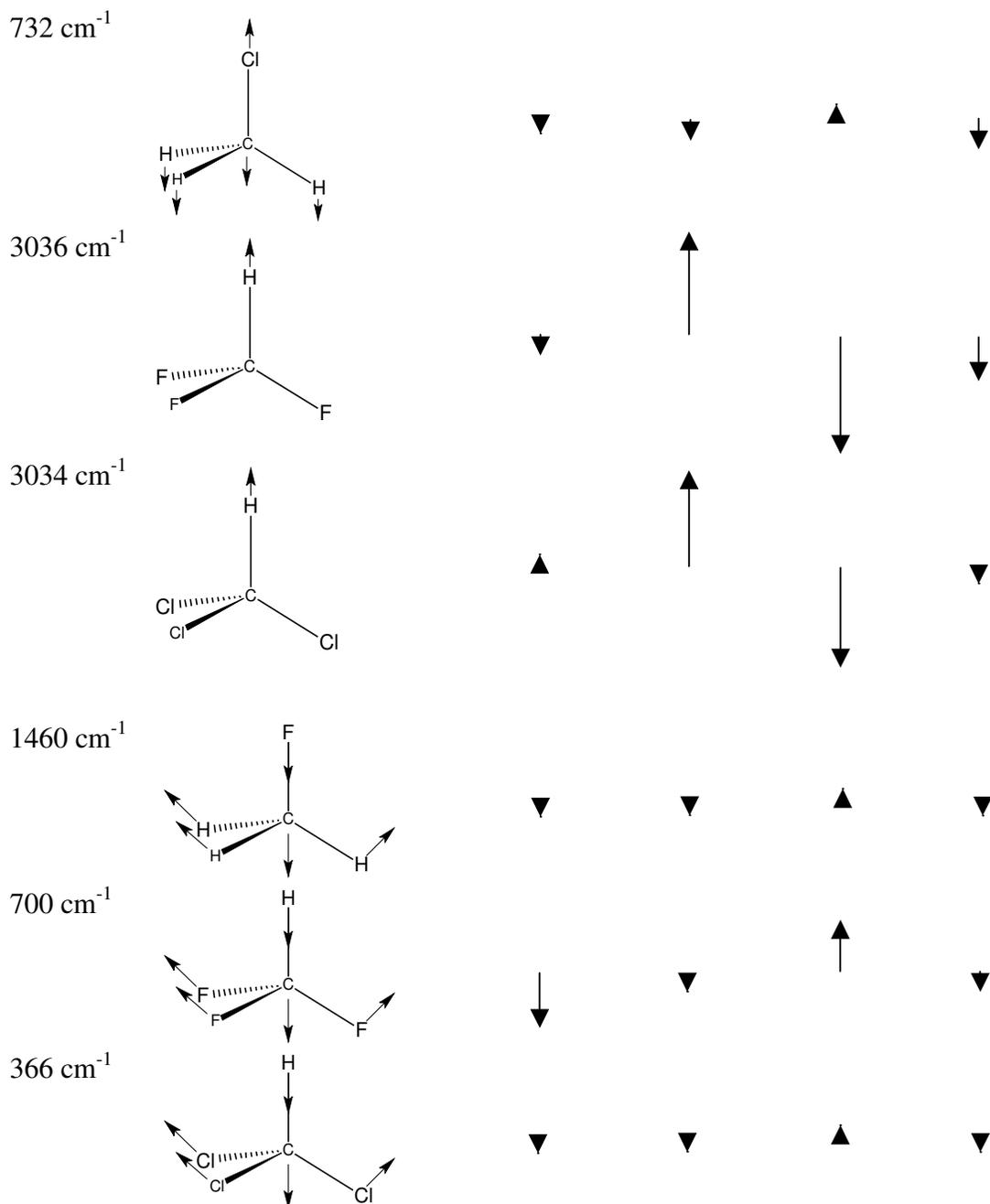


Figura 5 - Orientação espacial das moléculas no eixo Cartesiano, fase da coordenada normal e contribuições de carga, fluxo de carga e fluxo de dipolo. As setas indicam a polaridade - \longrightarrow +.

O gráfico da *Figura 6*, no qual a contribuição de carga foi plotada contra a contribuição do fluxo de dipolo para todos os movimentos de estiramento dos fluoro, cloro e fluoroclorometanos (dados da *Tabela 7*), mostra uma nítida

separação em grupos de acordo com o tipo de estiramento (C-F, C-Cl e C-H). A mesma análise poderia ser realizada em termos de carga e fluxo de carga, sendo que os pontos praticamente só inverteriam suas posições em relação ao eixo das ordenadas, pois para a grande maioria dos movimentos vibracionais o fluxo de carga possui sinal contrário ao fluxo de dipolo.

Os pontos referentes aos estiramentos C-F dos fluoro e fluoroclorometanos podem ser caracterizados por variações no momento dipolar molecular que possuem contribuições de carga entre $-0,23$ e $-0,74 e$, de fluxo de carga entre $-0,03$ e $+0,38 e$ e de fluxo de dipolo entre $+0,21$ e $-0,38 e$.

A separação dos pontos referentes aos estiramentos C-F se deve principalmente aos elevados valores das contribuições de carga para as derivadas do momento dipolar. Estes elevados valores são consistentes com os altos valores de cargas negativas dos átomos de flúor e de cargas positivas dos átomos carbono nos fluoro e fluoroclorometanos. A observação dos valores das três contribuições para as derivadas do momento dipolar do CH_3F , ilustradas na *Figura 5* através de setas com tamanhos proporcionais ao valor de cada contribuição, mostra que a contribuição de carga é a principal contribuição para o valor total da derivada do momento dipolar, pois apesar de sua seta ter praticamente o mesmo tamanho das setas das contribuições de fluxo, estas duas últimas contribuições se cancelam entre si. Quanto mais átomos de hidrogênio são substituídos por átomos de flúor e/ou de cloro nas moléculas de fluoro e fluoroclorometanos, maior será a contribuição de carga, enquanto que as contribuições de fluxo continuam se cancelando entre si. Este comportamento é observado para todos os estiramentos C-F dos fluoro e fluoroclorometanos, o que significa dizer que a contribuição de carga é a predominante para estes movimentos.

Os pontos referentes aos estiramentos C-Cl dos cloro e fluoroclorometanos podem ser caracterizados por variações no momento dipolar molecular que

possuem contribuições de carga entre $-0,07$ e $-0,43 e$, de fluxo de carga entre $-0,05$ e $-0,52 e$ e de fluxo de dipolo entre $+0,02$ e $+0,33 e$. Nestes estiramentos também se observa um cancelamento parcial dos fluxos.

Os pontos referentes aos estiramentos C-H dos fluoro e clorometanos podem ser caracterizados por contribuições de carga entre $-0,09$ e $+0,07 e$, de fluxo de carga entre $+0,23$ e $+0,64 e$ e de fluxo de dipolo entre $-0,36$ e $-0,73 e$. Novamente se observa um cancelamento parcial dos fluxos.

O gráfico da *Figura 7*, no qual a carga está plotada contra o fluxo de carga para todas as deformações seguramente atribuídas para os fluoro, cloro e fluoroclorometanos (dados da *Tabela 7*), mostra que embora as deformações FCF e ClCCl formem grupos bem definidos, os pontos das deformações HCH ficam mais dispersos variando por uma ampla faixa de contribuições de carga e fluxo de carga. Assim, as deformações não são tão bem caracterizadas em termos das contribuições de carga, fluxo de carga e fluxo de dipolo para as derivadas do momento dipolar.

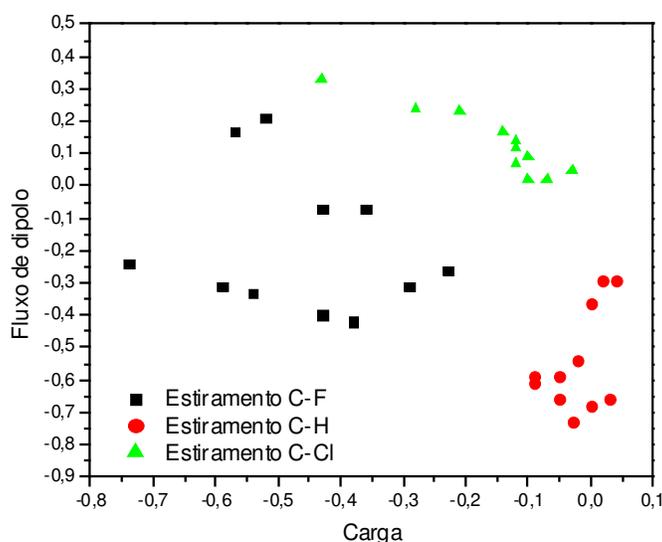


Figura 6 – Contribuição de carga plotada contra contribuição de fluxo de dipolo para os movimentos vibracionais de estiramento dos fluoro, cloro e fluoroclorometanos.

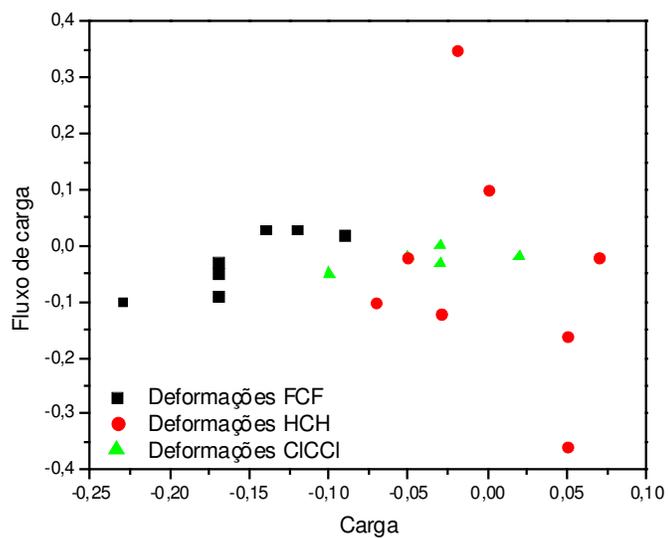


Figura 7 – Contribuição de carga plotada contra contribuição de fluxo de carga para os movimentos vibracionais de deformação dos fluoro, cloro e fluoroclorometanos.

6. Conclusões

Os dipolos atômicos são tão importantes quanto às cargas atômicas para reproduzir o momento dipolar molecular, bem como as suas derivadas.

O modelo Carga-Fluxo de Carga-Fluxo de Dipolo (CCFDF) utilizando parâmetros QTAIM no nível de cálculo MP2/6-311++G(3d,3p) produziu boas estimativas para as intensidades vibracionais dos fluoroclorometanos. Isto mostra que as alterações das estruturas eletrônicas dos fluoroclorometanos durante vibrações moleculares foram reproduzidas adequadamente por este modelo. Assim, as contribuições de carga, fluxo de carga e fluxo de dipolo podem ser utilizadas com segurança para se interpretar os fenômenos observados na distribuição de cargas eletrônicas durante os movimentos vibracionais.

Ficou esclarecido que o fenômeno de polarização da densidade eletrônica molecular acompanhando uma transferência de carga intramolecular no sentido contrário ocorre também para os fluoroclorometanos.

Os movimentos vibracionais de estiramento dos grupos funcionais dos fluoroclorometanos podem ser claramente identificados em termos de valores característicos das contribuições de carga, fluxo de carga e fluxo de dipolo. Em outras palavras, as características da alteração na estrutura eletrônica associada ao

estiramento de um dado grupo funcional dos fluoroclorometanos, se mantêm constante em qualquer molécula deste grupo.

7. Estudos Futuros

Há vários aspectos que poderão ser investigados para dar seqüência a este trabalho.

Um possível estudo seria averiguar se a correlação negativa entre as contribuições de fluxo de carga e fluxo de dipolo existe em moléculas com ambientes químicos diferentes dos já estudados. Um bom exemplo seriam moléculas com ligações dupla e tripla. Outro trabalho possível seria investigar a relação deste fenômeno observado na estrutura eletrônica através do modelo CCFDF com o efeito de doação-retrodoação em complexos de metais de transição.

A potencialidade que o modelo CCFDF/QTAIM tem mostrado para elucidar alterações na distribuição de carga eletrônica durante vibrações moleculares nos encorajada a estudar outros sistemas químicos maiores e de maior interesse para a ciência, como é o caso dos complexos de ligação de hidrogênio, os quais serão alvos de nossas pesquisas futuras.

8. Referências

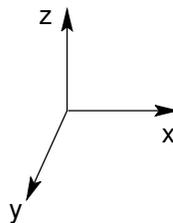
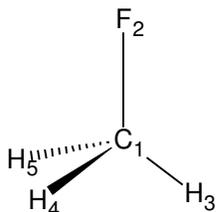
- [1] Haiduke, R. L. A.; Bruns, R. E. *J. Phys. Chem. A* **2005**, *109*, 2680.
- [2] César, P. H.; Faria, S. H. D. M.; Viçozo J. S. Jr.; Haiduke, R. L. A.; Bruns, R. E. *Chemical Physics* **2005**, *317*, 35.
- [3] Viçozo, J. S. Jr.; Haiduke, R. L. A.; Bruns, *J. Phys. Chem. A* **2006**, *110*, 4839.
- [4] Bader, R. F. W. *Atoms in Molecules: A Quantum Theory*; Clarendon Press: Oxford, **1990**.
- [5] King, W. T.; Mast, G. B. *J. Phys. Chem.* **1976**, *80*, 2521.
- [6] Bader, R. F. W.; Matta, C. F. *J. Phys. Chem. A* **2004**, *108*, 8385.
- [7] Bader, R. F. W.; Larouche, A.; Gatti, C.; Carroll, M. T.; MacDougall, P. J.; Wiberg, K. B. *J. Chem. Phys.*, **1987**, *87*, 1142.
- [8] Matta, C. F.; Gillespie, R. J. *J. Chem. Ed.* **2002**, *79*, 1141.
- [9] Person, W. B.; Newton, J. H. *J. Chem. Phys.* **1974**, *61*, 1040.
- [10] Biarge, J. F.; Herranz, J.; Morcillo, *J. An. R. Soc. Esp. Fis. Quim. Ser. A* **1961**, *57*, 81.
- [11] Wilson, E. B.; Decius J. C.; Cross, P. C. *Molecular Vibrations*; McGraw-Hill: New York, **1955**.
-

- [12] Overend, J. In *"Infrared Spectroscopy and Molecular Structure"*; Davis, M. Ed.; Elsevier: New York, **1963**; Chapter 10, p. 354.
- [13] M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, V. G. Zakrzewski, J. A. Montgomery, R. E. Stratmann, J. C. Burant, S. Dapprich, J. M. Millam, A. D. Daniels, K. N. Kudin, M. C. Strain, O. Farkas, J. Tomasi, V. Barone, M. Cossi, R. Cammi, B. Mennucci, C. Pomelli, C. Adamo, S. Clifford, J. Ochterski, G. A. Petersson, P. Y. Ayala, Q. Cui, K. Morokuma, D. K. Malick, A. D. Rabuck, K. Raghavachari, J. B. Foresman, J. Cioslowski, J. V. Ortiz, B. B. Stefanov, G. Liu, A. Liaskenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. Gomperts, R. L. Martin, D. J. Fox, T. Keith, M. A. Al-Laham, C. Y. Peng, A. Nanayakkara, C. Gonzalez, M. Challacombe, P. M. W. Gill, B. G. Johnson, W. Chen, M. W. Wong, J. L. Andres, M. Head-Gordon, E. S. Replogle, J. A. Pople, Gaussian 98 (Revision A.7), Gaussian Inc., Pittsburgh, PA, **1998**.
- [14] Oliveira, A. E.; Haiduke, R. L. A.; Bruns, R. E. *J. Phys. Chem. A* **2000**, *104*, 2000.
- [15] Lide, D. R., Ed. *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 78th ed.; CRC Press: Boca Raton, FL, 1997-1998.
- [16] Bode, J. H. G.; Smit, W. M. A., *J. Phys. Chem.* **1980** *84*, 198.
- [17] Saëki, S.; Mizuno, S.; Kondo, S., *Spectrochim. Acta A* **1976** *32*, 403.
- [18] Heicklen, J., *Spectrochim. Acta A* **1961**, *17*, 201.
- [19] Russell, J. W.; Needham, C. D.; Overend, J., *J. Chem. Phys.* **1966**, *45*, 3383.
- [20] Barrow, G. M.; McKean, D. C., *Proc. R. Soc. London Ser. A* **1952**, *213*, 27.
-

- [21] Mizuno, M.; Saëki, S., *Spectrochim. Acta A* **1976**, *32*, 1077.
- [22] Morcillo, J.; Zamarano, L. R.; Heredia, J. M. V., *Spectrochim. Acta A* **1966**, *22*, 1969.
- [23] Kondo, S.; Saëki, S., *J. Chem. Phys.*, **1981** *74*, 6603.
- [24] Levine, R. W.; Person, W. D., *J. Phys. Chem.* **1977**, *81*, 1118.
- [25] Morcillo, J.; Herranz, J.; Biarge, F., *Spectrochim. Acta* **1959**, *15*, 110.
- [26] Schurin, B., *J. Chem. Phys.* **1959**, *30*, 1.
- [27] Dickson, A. D.; Mills, I. M.; Crawford Jr., B. L., *J. Chem. Phys.* **1957**, *27*, 445.
- [28] Saëki, S.; Tanabe, K., *Spectrochim. Acta A* **1969**, *25*, 1325.
- [29] Tanabe, K.; Saëki, S., *Spectrochim. Acta A* **1970**, *26*, 1469.
- [30] Kim, K.; King, W. T., *J. Chem. Phys.*, **1984** *80*, 978.
- [31] Person, W. D.; Rudys, S. K.; Newton, J. H., *J. Phys. Chem.* **1975**, *79*, 2525.
- [32] Golden, W. G.; Horner, D.; Overend, J., *J. Chem. Phys.* **1978**, *68*, 964.
- [33] Varanasi, P.; Ko, F. K., *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **1977**, *17*, 385.
- [34] Varanasi, P.; Chudamani, K., *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **1988**, *39*, 193.
- [35] Person, W. D.; Rudys, S. K.; Newton, J. H., *J. Phys. Chem.*, **1975**, *79*, 2525.
- [36] Li, Z.; Varanasi, P., *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **1994**, *52*, 137.
- [37] Names, R.; Silvaggio, P. M.; Boese, R. W. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **1980**, *23*, 211.
- [38] Huheey J. E.; Keiter, E. A.; Keiter, R. L. *Inorganic Chemistry*: 4^o edition Hauper Collins College Publishers: New York, NY, p. 393-394, 425.
-

ANEXO

(Tensores polares atômicos dos fluoroclorometanos e suas contribuições de carga, fluxo de carga e fluxo de dipolo)

a) CH₃F

Tensores polares devido a carga:

Atomo	1		
	0.64109	0.00000	0.00000
	0.00000	0.64109	0.00000
	0.00000	0.00000	0.64109
Atomo	2		
	-0.64543	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.64543	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.64543
Atomo	3		
	0.00032	0.00000	0.00000
	0.00000	0.00032	0.00000
	0.00000	0.00000	0.00032
Atomo	4		
	0.00032	0.00000	0.00000
	0.00000	0.00032	0.00000
	0.00000	0.00000	0.00032
Atomo	5		
	0.00032	0.00000	0.00000
	0.00000	0.00032	0.00000
	0.00000	0.00000	0.00032

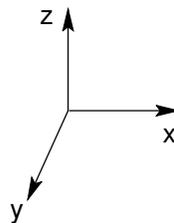
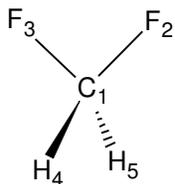
Tensores polares devido a fluxo de carga:

Atomo	1		
	-0.44304	0.00000	-0.00005
	0.00000	-0.44299	0.00000
	-0.07377	0.00000	-0.65851
Atomo	2		
	-0.03195	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.03199	0.00000
	0.07391	0.00000	0.54056
Atomo	3		
	0.43650	0.00000	-0.13542
	0.00000	-0.11959	0.00000
	-0.12952	0.00003	0.02440
Atomo	4		
	0.01924	-0.24068	0.06773
	-0.24052	0.29728	-0.11732
	0.09983	-0.17314	0.02445
Atomo	5		
	0.01924	0.24068	0.06773
	0.24052	0.29728	0.11732
	0.09983	0.17314	0.02445

Tensores polares devido a fluxo de dipolo:

Atomo	1		
	0.14465	0.00000	-0.00234

-0.00159	0.14521	-0.00098
-0.06101	0.00000	0.83188
Atomo	2	
0.38431	0.00000	0.00064
-0.00071	0.38477	-0.00030
0.06022	0.00000	-0.81850
Atomo	3	
-0.53015	0.00005	0.14257
-0.00180	0.18255	-0.00095
0.34479	-0.00003	-0.03196
Atomo	4	
0.00239	0.31083	-0.07074
0.31081	-0.35561	0.12379
-0.14095	0.24417	-0.03196
Atomo	5	
0.00239	-0.31083	-0.07074
-0.31084	-0.35561	-0.12379
-0.14095	-0.24417	-0.03196
Tensores polares:		
Atomo	1	
0.34270	0.00000	-0.00239
-0.00159	0.34331	-0.00098
-0.13478	0.00000	0.81446
Atomo	2	
-0.29307	0.00000	0.00064
-0.00071	-0.29265	-0.00030
0.13413	0.00000	-0.92337
Atomo	3	
-0.09333	0.00005	0.00715
-0.00180	0.06328	-0.00095
0.21527	0.00000	-0.00724
Atomo	4	
0.02195	0.07015	-0.00301
0.07029	-0.05801	0.00647
-0.04112	0.07103	-0.00719
Atomo	5	
0.02195	-0.07015	-0.00301
-0.07032	-0.05801	-0.00647
-0.04112	-0.07103	-0.00719

b) CH₂F₂

Tensores polares devido a carga:

Atomo	1		
	1.22227	0.00000	0.00000
	0.00000	1.22227	0.00000
	0.00000	0.00000	1.22227

Atomo	2		
	-0.64362	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.64362	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.64362

Atomo	3		
	-0.64362	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.64362	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.64362

Atomo	4		
	0.03249	0.00000	0.00000
	0.00000	0.03249	0.00000
	0.00000	0.00000	0.03249

Atomo	5		
	0.03249	0.00000	0.00000
	0.00000	0.03249	0.00000
	0.00000	0.00000	0.03249

Tensores polares devido a fluxo de carga:

Atomo	1		
	-0.76953	0.00000	0.00000
	-0.00009	-0.40754	-0.00005
	0.00000	0.00000	-0.45846

Atomo	2		
	0.41412	0.00000	0.31450
	0.00005	-0.07896	0.00005
	0.26134	0.00000	0.13697

Atomo	3		
	0.41417	0.00000	-0.31450
	0.00018	-0.07896	-0.00005
	-0.26096	0.00000	0.13697

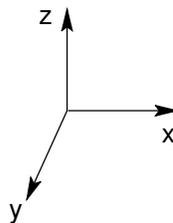
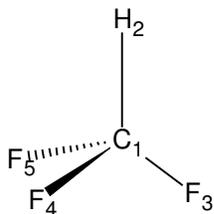
Atomo	4		
	-0.02919	0.00000	0.00000
	0.00000	0.28269	-0.25388
	0.00000	-0.30748	0.09231

Atomo	5		
	-0.02919	0.00000	0.00000
	0.00000	0.28269	0.25388
	0.00000	0.30748	0.09231

Tensores polares devido a fluxo de dipolo:

Atomo	1		
	1.08005	-0.00010	0.00018

0.00038	-0.12379	-0.00119
0.00000	0.00000	0.27092
Atomo	2	
-0.54996	-0.00003	-0.69162
0.00058	0.43355	-0.00013
-0.50328	0.00000	0.00314
Atomo	3	
-0.54972	-0.00003	0.69159
0.00032	0.43355	-0.00032
0.50276	0.00000	0.00317
Atomo	4	
0.01004	0.00011	0.00010
0.00003	-0.37212	0.27453
0.00000	0.40607	-0.13948
Atomo	5	
0.01004	0.00011	-0.00010
0.00003	-0.37212	-0.27453
0.00000	-0.40607	-0.13948
Tensores polares:		
Atomo	1	
1.53279	-0.00010	0.00018
0.00029	0.69094	-0.00124
0.00000	0.00000	1.03473
Atomo	2	
-0.77946	-0.00003	-0.37712
0.00063	-0.28903	-0.00008
-0.24194	0.00000	-0.50351
Atomo	3	
-0.77917	-0.00003	0.37709
0.00050	-0.28903	-0.00037
0.24180	0.00000	-0.50348
Atomo	4	
0.01334	0.00011	0.00010
0.00003	-0.05694	0.02065
0.00000	0.09859	-0.01468
Atomo	5	
0.01334	0.00011	-0.00010
0.00003	-0.05694	-0.02065
0.00000	-0.09859	-0.01468

c) CHF₃

Tensores polares devido a carga:

Atomo	1		
	1.84573	0.00000	0.00000
	0.00000	1.84573	0.00000
	0.00000	0.00000	1.84573
Atomo	2		
	0.07670	0.00000	0.00000
	0.00000	0.07670	0.00000
	0.00000	0.00000	0.07670
Atomo	3		
	-0.64079	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.64079	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.64079
Atomo	4		
	-0.64079	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.64079	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.64079
Atomo	5		
	-0.64079	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.64079	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.64079

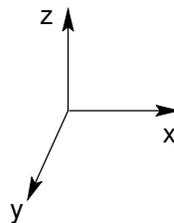
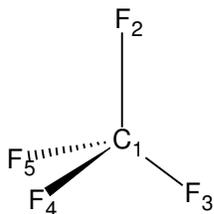
Tensores polares devido a fluxo de carga:

Atomo	1		
	-0.84296	0.00000	0.00000
	0.00005	-0.84298	0.00000
	-0.00117	0.00000	-0.38904
Atomo	2		
	-0.04453	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.04454	0.00000
	0.00212	-0.00015	0.51348
Atomo	3		
	0.64220	-0.00009	-0.24673
	-0.00005	-0.05035	0.00000
	-0.19413	0.00027	-0.04252
Atomo	4		
	0.12274	-0.29982	0.12337
	-0.29993	0.46912	-0.21368
	0.09674	-0.16821	-0.04282
Atomo	5		
	0.12283	0.29992	0.12337
	0.29998	0.46896	0.21368
	0.09606	0.16858	-0.04284

Tensores polares devido a fluxo de dipolo:

Atomo	1		
	0.80602	-0.00129	0.00015

0.00029	0.80589	0.00053
0.00458	-0.00003	-0.32880
Atomo	2	
-0.02557	-0.00079	-0.00016
0.00032	-0.01868	0.00005
-0.00673	0.00029	-0.64179
Atomo	3	
-0.91274	-0.00175	0.51721
-0.00245	0.38675	0.00032
0.31934	0.00000	0.32765
Atomo	4	
0.06386	0.56797	-0.25908
0.56842	-0.58426	0.44695
-0.15991	0.28111	0.32894
Atomo	5	
0.06476	-0.56773	-0.25741
-0.56705	-0.58708	-0.44788
-0.15820	-0.28163	0.32894
Tensores polares:		
Atomo	1	
1.80879	-0.00129	0.00015
0.00034	1.80864	0.00053
0.00341	-0.00003	1.12789
Atomo	2	
0.00660	-0.00079	-0.00016
0.00032	0.01348	0.00005
-0.00461	0.00014	-0.05161
Atomo	3	
-0.91133	-0.00184	0.27048
-0.00250	-0.30439	0.00032
0.12521	0.00027	-0.35566
Atomo	4	
-0.45419	0.26815	-0.13571
0.26849	-0.75593	0.23327
-0.06317	0.11290	-0.35467
Atomo	5	
-0.45320	-0.26781	-0.13404
-0.26707	-0.75891	-0.23420
-0.06214	-0.11305	-0.35469

d) CF₄

Tensores polares devido a carga:

Atomo	1		
	2.51229	0.00000	0.00000
	0.00000	2.51229	0.00000
	0.00000	0.00000	2.51229

Atomo	2		
	-0.62807	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.62807	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.62807

Atomo	3		
	-0.62807	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.62807	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.62807

Atomo	4		
	-0.62807	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.62807	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.62807

Atomo	5		
	-0.62807	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.62807	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.62807

Tensores polares devido a fluxo de carga:

Atomo	1		
	-0.98110	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.98085	0.00000
	-0.00044	0.00000	-0.98038

Atomo	2		
	-0.07313	0.00003	0.00000
	0.00000	-0.07322	0.00000
	0.00004	0.00002	0.88184

Atomo	3		
	0.77598	0.00003	-0.30018
	0.00005	-0.07322	0.00000
	-0.30019	0.00002	0.03300

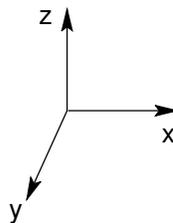
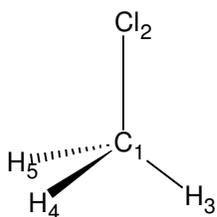
Atomo	4		
	0.13936	-0.36751	0.15009
	-0.36804	0.56348	-0.25996
	0.15030	-0.25987	0.03300

Atomo	5		
	0.13933	0.36751	0.15012
	0.36809	0.56348	0.26002
	0.15027	0.25987	0.03302

Tensores polares devido a fluxo de dipolo:

Atomo	1		
	0.48791	0.00630	0.00003

-0.00122	0.49404	0.01220
-0.00916	0.00235	0.50528
Atomo	2	
0.40226	0.00063	0.01027
-0.00239	0.40122	0.00273
-0.00801	-0.00053	-1.15695
Atomo	3	
-0.98770	0.00150	0.48108
0.00491	0.40263	0.00778
0.49140	-0.00256	0.23538
Atomo	4	
0.05766	0.60025	-0.23348
0.60348	-0.64349	0.42129
-0.24315	0.42305	0.23780
Atomo	5	
0.05789	-0.59981	-0.24769
-0.60456	-0.64074	-0.41325
-0.24693	-0.42448	0.23695
Tensores polares:		
Atomo	1	
2.01910	0.00630	0.00003
-0.00122	2.02548	0.01220
-0.00960	0.00235	2.03719
Atomo	2	
-0.29894	0.00066	0.01027
-0.00239	-0.30007	0.00273
-0.00797	-0.00051	-0.90318
Atomo	3	
-0.83979	0.00153	0.18090
0.00496	-0.29866	0.00778
0.19121	-0.00254	-0.35969
Atomo	4	
-0.43105	0.23274	-0.08339
0.23544	-0.70808	0.16133
-0.09285	0.16318	-0.35727
Atomo	5	
-0.43085	-0.23230	-0.09757
-0.23647	-0.70533	-0.15323
-0.09666	-0.16461	-0.35810

e) CH₃Cl

Tensores polares devido a carga:

Atomo	1		
	0.18964	0.00000	0.00000
	0.00000	0.18964	0.00000
	0.00000	0.00000	0.18964
Atomo	2		
	-0.25373	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.25373	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.25373
Atomo	3		
	0.02138	0.00000	0.00000
	0.00000	0.02138	0.00000
	0.00000	0.00000	0.02138
Atomo	4		
	0.02138	0.00000	0.00000
	0.00000	0.02138	0.00000
	0.00000	0.00000	0.02138
Atomo	5		
	0.02138	0.00000	0.00000
	0.00000	0.02138	0.00000
	0.00000	0.00000	0.02138

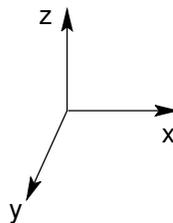
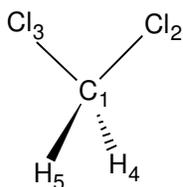
Tensores polares devido a fluxo de carga:

Atomo	1		
	-0.54966	0.00000	0.00005
	0.00000	-0.54966	0.00000
	0.00236	0.00000	0.54193
Atomo	2		
	-0.01480	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.01477	0.00000
	-0.00067	0.00000	-0.20970
Atomo	3		
	0.48077	0.00000	-0.14190
	0.00000	-0.10420	0.00000
	-0.17908	0.00000	-0.10969
Atomo	4		
	0.04184	-0.25323	0.07095
	-0.25312	0.33432	-0.12289
	0.08986	-0.15521	-0.10969
Atomo	5		
	0.04184	0.25323	0.07095
	0.25312	0.33432	0.12289
	0.08986	0.15521	-0.10969

Tensores polares devido a fluxo de dipolo:

Atomo	1		
	0.45049	-0.00003	0.00040

0.00072	0.44868	0.00056
-0.00330	0.00000	-0.09826
Atomo	2	
0.08644	0.00000	0.00077
-0.00130	0.08162	0.00008
0.00239	0.00003	-0.00189
Atomo	3	
-0.52385	0.00000	0.17273
0.00167	0.16030	0.00177
0.23586	0.00000	0.03428
Atomo	4	
-0.01278	0.29517	-0.08812
0.29884	-0.34944	0.14852
-0.11798	0.20326	0.03428
Atomo	5	
-0.01278	-0.29517	-0.08812
-0.29884	-0.34944	-0.14852
-0.11798	-0.20326	0.03428
Tensores polares:		
Atomo	1	
0.09047	-0.00003	0.00045
0.00072	0.08866	0.00056
-0.00094	0.00000	0.63331
Atomo	2	
-0.18209	0.00000	0.00077
-0.00130	-0.18688	0.00008
0.00172	0.00003	-0.46532
Atomo	3	
-0.02170	0.00000	0.03083
0.00167	0.07748	0.00177
0.05678	0.00000	-0.05403
Atomo	4	
0.05044	0.04194	-0.01717
0.04572	0.00626	0.02563
-0.02812	0.04805	-0.05403
Atomo	5	
0.05044	-0.04194	-0.01717
-0.04572	0.00626	-0.02563
-0.02812	-0.04805	-0.05403

f) CH_2Cl_2 

Tensores polares devido a carga:

Atomo	1		
	0.27080	0.00000	0.00000
	0.00000	0.27080	0.00000
	0.00000	0.00000	0.27080

Atomo	2		
	-0.19662	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.19662	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.19662

Atomo	3		
	-0.19662	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.19662	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.19662

Atomo	4		
	0.06120	0.00000	0.00000
	0.00000	0.06120	0.00000
	0.00000	0.00000	0.06120

Atomo	5		
	0.06120	0.00000	0.00000
	0.00000	0.06120	0.00000
	0.00000	0.00000	0.06120

Tensores polares devido a fluxo de carga:

Atomo	1		
	1.18806	0.00000	0.00000
	-0.00018	-0.61843	-0.00018
	0.00015	-0.00027	0.12850

Atomo	2		
	-0.39362	0.00000	-0.18043
	0.00022	-0.03042	0.00027
	-0.07477	-0.00054	-0.08053

Atomo	3		
	-0.39362	0.00000	0.18043
	0.00022	-0.03042	-0.00027
	0.07470	0.00054	-0.08053

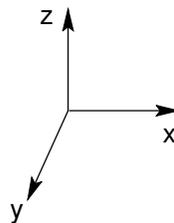
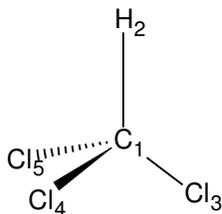
Atomo	4		
	-0.20041	0.00000	0.00000
	-0.00013	0.33951	0.26304
	0.00036	0.30651	0.01806

Atomo	5		
	-0.20041	0.00000	0.00000
	-0.00013	0.33969	-0.29754
	-0.00036	-0.30624	0.15915

Tensores polares devido a fluxo de dipolo:

Atomo	1		
	-0.17900	-0.00018	0.00026

-0.00032	0.45582	-0.00071
0.00048	0.00003	-0.05069
Atomo	2	
0.02328	-0.00026	-0.05059
-0.00087	0.11525	-0.00101
-0.01659	-0.00011	0.10261
Atomo	3	
0.02339	-0.00026	0.05085
0.00071	0.11525	-0.00196
0.01636	0.00011	0.10274
Atomo	4	
0.06469	0.00024	0.00000
-0.00019	-0.34518	-0.29177
0.00042	-0.34379	-0.07776
Atomo	5	
0.06469	-0.00016	0.00011
-0.00019	-0.34486	0.31588
-0.00042	0.34366	-0.20927
Tensores polares:		
Atomo	1	
1.27986	-0.00018	0.00026
-0.00050	0.10819	-0.00089
0.00063	-0.00024	0.34861
Atomo	2	
-0.56696	-0.00026	-0.23102
-0.00065	-0.11179	-0.00074
-0.09136	-0.00065	-0.17454
Atomo	3	
-0.56685	-0.00026	0.23128
0.00093	-0.11179	-0.00223
0.09106	0.00065	-0.17441
Atomo	4	
-0.07452	0.00024	0.00000
-0.00032	0.05553	-0.02873
0.00078	-0.03728	0.00150
Atomo	5	
-0.07452	-0.00016	0.00011
-0.00032	0.05603	0.01834
-0.00078	0.03742	0.01108

g) CHCl_3 

Tensores polares devido a carga:

Atomo	1		
	0.33768	0.00000	0.00000
	0.00000	0.33768	0.00000
	0.00000	0.00000	0.33768
Atomo	2		
	0.09662	0.00000	0.00000
	0.00000	0.09662	0.00000
	0.00000	0.00000	0.09662
Atomo	3		
	-0.14471	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.14471	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.14471
Atomo	4		
	-0.14471	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.14471	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.14471
Atomo	5		
	-0.14471	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.14471	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.14471

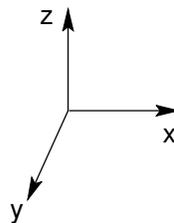
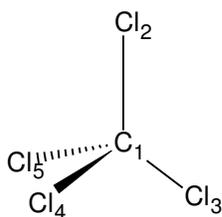
Tensores polares devido a fluxo de carga:

Atomo	1		
	1.24364	0.00004	0.00000
	0.00007	1.24369	0.00000
	0.00406	-0.00011	-0.30357
Atomo	2		
	-0.23159	-0.00025	0.00000
	0.00015	-0.23166	0.00000
	-0.00340	0.00030	0.48686
Atomo	3		
	-0.56965	0.00000	0.11827
	0.00015	-0.10493	0.00007
	0.04617	0.00046	-0.06132
Atomo	4		
	-0.22110	0.20121	-0.05920
	0.20129	-0.45358	0.10239
	-0.02582	0.04097	-0.06130
Atomo	5		
	-0.22106	-0.20134	-0.05907
	-0.20121	-0.45337	-0.10246
	-0.02531	-0.04165	-0.06186

Tensores polares devido a fluxo de dipolo:

Atomo	1		
	-0.31516	0.00074	0.00043

-0.00183	-0.30985	-0.00227
-0.00655	-0.00048	0.10076
Atomo	2	
0.07404	-0.00236	-0.00008
0.00494	0.06524	-0.00164
0.00892	-0.00151	-0.52457
Atomo	3	
0.05716	-0.00207	0.00868
-0.00038	0.12484	0.00482
0.00060	-0.00176	0.13817
Atomo	4	
0.09392	0.03374	-0.00855
0.03884	0.06515	0.00511
0.00418	-0.00389	0.13817
Atomo	5	
0.09449	-0.03721	-0.00570
-0.03593	0.06277	-0.00857
0.00233	0.00542	0.13803
Tensores polares:		
Atomo	1	
1.26616	0.00078	0.00043
-0.00176	1.27152	-0.00227
-0.00249	-0.00059	0.13487
Atomo	2	
-0.06093	-0.00261	-0.00008
0.00509	-0.06980	-0.00164
0.00552	-0.00121	0.05891
Atomo	3	
-0.65720	-0.00207	0.12695
-0.00023	-0.12480	0.00489
0.04677	-0.00130	-0.06786
Atomo	4	
-0.27189	0.23495	-0.06775
0.24013	-0.53314	0.10750
-0.02164	0.03708	-0.06784
Atomo	5	
-0.27128	-0.23855	-0.06477
-0.23714	-0.53531	-0.11103
-0.02298	-0.03623	-0.06854

h) CCl_4 

Tensores polares devido a carga:

Atomo	1		
	0.39713	0.00000	0.00000
	0.00000	0.39713	0.00000
	0.00000	0.00000	0.39713

Atomo	2		
	-0.09926	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.09926	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.09926

Atomo	3		
	-0.09926	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.09926	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.09926

Atomo	4		
	-0.09926	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.09926	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.09926

Atomo	5		
	-0.09926	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.09926	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.09926

Tensores polares devido a fluxo de carga:

Atomo	1		
	1.25156	-0.00004	-0.00008
	0.00000	1.25168	0.00000
	0.00000	-0.00003	1.25167

Atomo	2		
	-0.12951	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.12948	0.00000
	0.00009	0.00009	-0.67956

Atomo	3		
	-0.61840	0.00000	0.17284
	0.00007	-0.12948	0.00000
	0.17281	0.00000	-0.19069

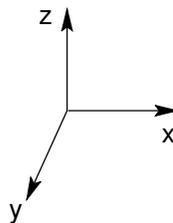
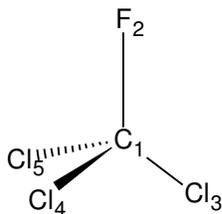
Atomo	4		
	-0.25159	0.21172	-0.08638
	0.21161	-0.49618	0.14961
	-0.08633	0.14980	-0.19066

Atomo	5		
	-0.25164	-0.21172	-0.08638
	-0.21168	-0.49618	-0.14961
	-0.08636	-0.14980	-0.19066

Tensores polares devido a fluxo de dipolo:

Atomo	1		
	-0.46699	0.00594	0.01574

-0.00211	-0.46455	-0.00560
-0.00513	-0.00877	-0.44287
Atomo	2	
0.13168	0.00259	-0.00786
-0.00831	0.14942	-0.01588
-0.02817	-0.00150	0.06431
Atomo	3	
0.07813	-0.00233	0.00159
-0.00209	0.14461	-0.00407
0.00812	-0.00657	0.12951
Atomo	4	
0.14235	0.02931	0.00383
0.01437	0.11634	0.00278
-0.01716	0.01248	0.13174
Atomo	5	
0.12839	-0.02617	-0.00284
-0.02034	0.12108	-0.00151
-0.01857	-0.01069	0.13225
Tensores polares:		
Atomo	1	
1.18170	0.00590	0.01566
-0.00211	1.18426	-0.00560
-0.00513	-0.00880	1.20593
Atomo	2	
-0.09709	0.00259	-0.00786
-0.00831	-0.07932	-0.01588
-0.02808	-0.00141	-0.71451
Atomo	3	
-0.63953	-0.00233	0.17443
-0.00202	-0.08413	-0.00407
0.18093	-0.00657	-0.16044
Atomo	4	
-0.20850	0.24103	-0.08255
0.22598	-0.47910	0.15239
-0.10349	0.16228	-0.15818
Atomo	5	
-0.22251	-0.23789	-0.08922
-0.23202	-0.47436	-0.15112
-0.10493	-0.16049	-0.15767

i) CFCl_3 

Tensores polares devido a carga:

Atomo	1		
	0.90016	0.00000	0.00000
	0.00000	0.90016	0.00000
	0.00000	0.00000	0.90016
Atomo	2		
	-0.60733	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.60733	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.60733
Atomo	3		
	-0.09762	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.09762	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.09762
Atomo	4		
	-0.09762	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.09762	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.09762
Atomo	5		
	-0.09762	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.09762	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.09762

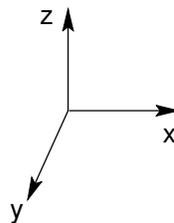
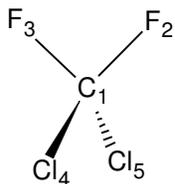
Tensores polares devido a fluxo de carga:

Atomo	1		
	1.45393	0.00000	0.00000
	0.00000	1.46098	0.00000
	0.01820	-0.00008	-0.45165
Atomo	2		
	-0.19108	0.00000	0.00000
	0.00007	-0.19083	0.00000
	-0.00228	0.00010	0.70222
Atomo	3		
	-0.68971	0.00000	0.17454
	0.00000	-0.15351	0.00007
	0.03786	0.00028	-0.08371
Atomo	4		
	-0.28584	0.22942	-0.08721
	0.22932	-0.55087	0.15119
	-0.02560	0.04461	-0.08366
Atomo	5		
	-0.28584	-0.22938	-0.08725
	-0.22932	-0.55080	-0.15112
	-0.02565	-0.04459	-0.08367

Tensores polares devido a fluxo de dipolo:

Atomo	1		
	-0.84435	0.00439	0.00224

0.00852	-0.75974	-0.00268
-0.06803	-0.00016	0.71571
Atomo	2	
0.45232	-0.00296	0.00056
0.00299	0.44348	-0.00027
0.00801	-0.00132	-1.07412
Atomo	3	
0.18872	-0.00370	-0.05180
-0.00382	0.13153	-0.00921
0.18556	0.00064	0.12257
Atomo	4	
0.12136	0.02509	0.02331
0.02509	0.09618	-0.04625
-0.04414	0.08140	0.12252
Atomo	5	
0.12742	-0.02131	0.02844
-0.02551	0.09233	0.04328
-0.04253	-0.08153	0.12252
Tensores polares:		
Atomo	1	
1.50974	0.00439	0.00224
0.00852	1.60140	-0.00268
-0.04983	-0.00024	1.16422
Atomo	2	
-0.34609	-0.00296	0.00056
0.00306	-0.35468	-0.00027
0.00573	-0.00122	-0.97923
Atomo	3	
-0.59861	-0.00370	0.12274
-0.00382	-0.11960	-0.00914
0.22342	0.00092	-0.05876
Atomo	4	
-0.26210	0.25451	-0.06390
0.25441	-0.55231	0.10494
-0.06974	0.12601	-0.05876
Atomo	5	
-0.25604	-0.25069	-0.05881
-0.25483	-0.55609	-0.10784
-0.06818	-0.12612	-0.05877

j) CF_2Cl_2 

Tensores polares devido a carga:

Atomo	1		
	1.41976	0.00000	0.00000
	0.00000	1.41976	0.00000
	0.00000	0.00000	1.41976

Atomo	2		
	-0.61698	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.61698	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.61698

Atomo	3		
	-0.61698	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.61698	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.61698

Atomo	4		
	-0.09575	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.09575	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.09575

Atomo	5		
	-0.09573	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.09573	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.09573

Tensores polares devido a fluxo de carga:

Atomo	1		
	-1.05280	0.00000	0.00000
	0.00276	1.68636	0.00262
	0.00000	0.00000	0.27570

Atomo	2		
	0.57839	0.00000	0.47154
	0.00094	-0.23766	-0.00291
	0.24002	-0.00142	0.05725

Atomo	3		
	0.57839	0.00000	-0.47154
	0.00094	-0.23766	0.00291
	-0.24002	0.00142	0.05725

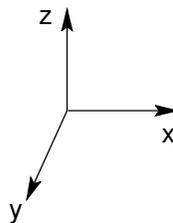
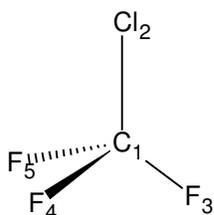
Atomo	4		
	-0.05334	0.00000	0.00000
	0.00174	-0.60719	0.28322
	0.00048	0.13804	-0.19754

Atomo	5		
	-0.05334	0.00000	0.00000
	0.00174	-0.60995	-0.28016
	-0.00048	-0.13838	-0.19748

Tensores polares devido a fluxo de dipolo:

Atomo	1		
	0.93777	0.00853	-0.01624

0.00766	-1.06340	0.00206
0.00000	0.00000	-0.02950
Atomo	2	
-0.59079	-0.00024	-0.82296
-0.00073	0.43339	-0.00457
-0.62047	0.01312	-0.04305
Atomo	3	
-0.59079	-0.00024	0.82296
-0.00073	0.43339	0.00457
0.62047	-0.01312	-0.04305
Atomo	4	
0.10682	-0.00082	-0.00455
0.00204	0.08729	-0.03538
-0.00185	0.11162	0.09240
Atomo	5	
0.10682	0.01064	-0.00434
0.00204	0.08360	0.03914
0.00185	-0.10980	0.09222
Tensores polares:		
Atomo	1	
1.30473	0.00853	-0.01624
0.01042	2.04272	0.00468
0.00000	0.00000	1.66596
Atomo	2	
-0.62938	-0.00024	-0.35142
0.00021	-0.42125	-0.00748
-0.38045	0.01170	-0.60278
Atomo	3	
-0.62938	-0.00024	0.35142
0.00021	-0.42125	0.00748
0.38045	-0.01170	-0.60278
Atomo	4	
-0.04227	-0.00082	-0.00455
0.00378	-0.61565	0.24784
-0.00137	0.24966	-0.20089
Atomo	5	
-0.04225	0.01064	-0.00434
0.00378	-0.62208	-0.24102
0.00137	-0.24818	-0.20099

k) CF_3Cl 

Tensores polares devido a carga:

Atomo	1		
	1.95850	0.00000	0.00000
	0.00000	1.95850	0.00000
	0.00000	0.00000	1.95850

Atomo	2		
	-0.09077	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.09077	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.09077

Atomo	3		
	-0.62388	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.62388	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.62388

Atomo	4		
	-0.62381	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.62381	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.62381

Atomo	5		
	-0.62388	0.00000	0.00000
	0.00000	-0.62388	0.00000
	0.00000	0.00000	-0.62388

Tensores polares devido a fluxo de carga:

Atomo	1		
	-1.02648	0.00296	0.00015
	-0.00372	-1.02487	-0.00027
	0.00360	-0.01176	1.15522

Atomo	2		
	-0.05947	-0.00689	-0.00003
	0.00270	-0.05955	0.00005
	-0.01170	0.00361	-0.58709

Atomo	3		
	0.78590	0.00327	-0.32405
	-0.00881	-0.06193	0.00961
	-0.08383	0.00309	-0.19358

Atomo	4		
	0.15118	-0.36292	0.15386
	-0.37090	0.56877	-0.28571
	0.02100	-0.04944	-0.18867

Atomo	5		
	0.14794	0.36944	0.17035
	0.36291	0.57714	0.27583
	0.03215	0.04291	-0.19358

Tensores polares devido a fluxo de dipolo:

Atomo	1		
	0.71165	0.00059	0.00087

0.01450	0.70635	0.00261
-0.00085	0.00063	-0.80934
Atomo	2	
0.06043	0.00442	-0.00085
-0.01973	0.09894	0.00044
-0.00979	0.00590	0.04686
Atomo	3	
-0.97568	0.00158	0.62609
-0.00070	0.47189	0.02427
0.36925	0.00486	0.25560
Atomo	4	
0.06384	0.59848	-0.28134
0.57865	-0.60618	0.56202
-0.18299	0.34770	0.24586
Atomo	5	
0.06470	-0.60583	-0.29202
-0.57634	-0.61218	-0.55440
-0.18235	-0.35783	0.25565
Tensores polares:		
Atomo	1	
1.64367	0.00355	0.00102
0.01078	1.63998	0.00234
0.00275	-0.01113	2.30438
Atomo	2	
-0.08981	-0.00247	-0.00088
-0.01703	-0.05138	0.00049
-0.02149	0.00951	-0.63100
Atomo	3	
-0.81366	0.00485	0.30204
-0.00951	-0.21392	0.03388
0.28542	0.00795	-0.56186
Atomo	4	
-0.40879	0.23556	-0.12748
0.20775	-0.66122	0.27631
-0.16199	0.29826	-0.56662
Atomo	5	
-0.41124	-0.23639	-0.12167
-0.21343	-0.65892	-0.27857
-0.15020	-0.31492	-0.56181
