

TAXA DE REAÇÃO DE SISTEMAS REAGENTES ENVOLVENDO HALOGÊNIOS

João Pedro Marretto Helmeister¹ (FCA, UNICAMP, Bolsista PIBIC)

Patrícia P. R. Barreto² (LABAP/INPE, Orientadora)

RESUMO

Como forma de progredir nos estudos de taxa de reação e Teoria do Estado de Transição, em uma abordagem teórica, realizaram-se cálculos ab initio por meio do software Gaussian, de modo a investigar a cinética da reação entre metanol (CH_3OH) com átomos do grupo dos halogênios (Br, F e Cl) e o hidrogênio, explorando as vias de reação que podem ser encontradas. As otimizações de geometria e cálculos de frequência foram realizados utilizando a teoria do funcional da densidade (DFT) utilizando o método B3LYP com a base 6-311g(2d,d,p) e as energias foram calculadas em CBS-QB3 e CCSD(T). Para cada grupo de reagentes foram encontrados três caminhos de reação diferentes ($\text{OH}+\text{CH}_3\text{X}$, $\text{HX}+\text{CH}_3\text{O}$ e $\text{HOX}+\text{CH}_3$). Todos os dados foram tratados com o software APUAMA, desenvolvido pelo grupo, as taxas de reação foram calculadas na faixa de temperatura de 200K – 4000K. O código APUAMA também fornece as propriedades termodinâmicas das espécies envolvidas. Como existem diferentes caminhos de reação, as taxas de ramificação entre os diferentes produtos foram calculadas a fim de determinar qual caminho de reação é o mais provável. Dados geométricos, frequências e taxas calculadas foram comparados com as referências, com boa concordância. No nosso conhecimento, alguns dos caminhos explorados neste estudo não possuem referenciais disponíveis.

Palavras-Chave: Taxa de Reação, Teoria do Estado de Transição, DFT, Metanol, Halogênios.

¹ João Pedro Marretto Helmeister do curso de bacharelado em Engenharia de Manufatura - **E-mail: j174564@dac.unicamp.br**

² Patrícia Regina Pereira Barreto- **E-mail: patricia.barreto@inpe.br**