

TAXA DE REAÇÃO DE SISTEMAS REAGENTES ENVOLVENDO HALOGÊNIO

João Pedro Marretto Helmeister¹ (FCA/UNICAMP, Bolsista PIBIC/CNPq)
Patrícia Regina Pereira Barreto² (INPE, Orientadora)

RESUMO

O trabalho em questão teve início em 2021 fundamentando-se no estudo de taxas de reação, via Teoria do Estados de Transição (TST) para sistemas envolvendo os halogênios, em particular reações do metanol (CH₃OH) e átomos de bromo, flúor e cloro (Br, F e Cl) e o hidrogênio (H), tendo como base o software APUAMA para o cálculo da taxa de reação e propriedades termodinâmicas. A partir disso, optou-se pela reescrita do código do APUAMA para a linguagem *Python*, que permitirá maior flexibilidade e funções do programa. Dentre as melhorias inclui-se a extração de dados das saídas do GAUSSIAN, sem necessidade de coleta manual, eliminando possíveis erros. Além de fornecer um conjunto de bibliotecas do *Python* para cálculos de integrais (*Sympy*), como é o caso das correções de tunelamento, obtendo maior precisão de resultados, ao comparar-se com as versões anteriores do APUAMA.

Palavras-Chave: APUAMA, Python, tunelamento, taxas de reação, TST.

¹ Aluno do curso de bacharelado em Engenharia de Produção - E-mail: j174564@dac.unicamp.br

² Pesquisadora do INPE - E-mail: patricia.barreto@inpe.br