

# ESTUDO DA TEORIA DE TRANSIÇÃO VARIACIONAL PARA SISTEMAS DE INTERESSE AMBIENTAL

Henrique de Oliveira Euclides<sup>1</sup> (UNIFESP, Bolsista PIBIC/CNPq)  
Patrícia R. P. Barreto<sup>2</sup> (LAP/INPE, Orientadora)

## RESUMO

Este trabalho, iniciado em março de 2013, tem como objetivo o desenvolvimento de programas para obtenção e correção da taxa de reação de um sistema de reagentes, com a correção de tunelamento de pequena curvatura, correção usando coeficiente de transmissão de Wigner e Eckart, e apresentada na forma de Arrhenius. Varias etapas foram desenvolvidas, inicialmente desenvolveu programas para a coleta de informações cruciais de programas de estrutura eletrônica, GAUSSIAN09, tais como geometria, frequência e energia das espécies reativas, que posteriormente serão utilizadas nos códigos que serão desenvolvidos. Utilizando com base um programa em Fortran, foi desenvolvido um novo programa, afim de obter algum ganho de memória e algumas otimizações, em linguagem C, para o cálculo de propriedades termodinâmicas de espécies reativas as quais são impressa no formato das tabelas da JANAF. Em seguida foi reescrito o programa para o cálculo da taxa de reação, com as correções de Wigner e Eckart, também em C, e impresso na forma de Arrhenius. Uma nova etapa foi implementada na qual é levada em consideração o tunelamento variacional utilizando uma integração numérica. No cálculo da integral numérica foi usado a fórmula de Newton-cotes nomeada de regra 1/3 de Simpson, que é de fácil implementação e tem uma complexidade algorítmica da ordem de  $O(n)$  com  $n$  sendo o número de passos que dividimos o intervalo. Para dar continuidade a esse projeto de iniciação científica esta planejado o desenvolvimento de um website contendo o cálculo da taxa de reação com suas respectivas correções citadas.

---

<sup>1</sup>Aluno do Curso de Matemática Computacional – Email: henriqueuclides@gmail.com

<sup>2</sup>Pesquisadora de Química Quântica Computacional – Email: patricia@plasma.inpe.br