

ESTUDO DA TEORIA DE TRANSIÇÃO VARIACIONAL PARA SISTEMAS DE INTERESSE AMBIENTAL

Henrique de Oliveira Euclides¹ (UNIFESP, Bolsista PIBIC/CNPq)
Patrícia R. P. Barreto² (LAP/INPE, Orientadora)

RESUMO

Este trabalho, iniciado em agosto de 2013, tem como objetivo a continuidade ao projeto de Iniciação Científica em desenvolvimento desde março de 2013. Nós estamos estudando quinze reações do tipo $HX + H = H_2 + X$, $HX + H = H + HX$, $HX + Y = X + HY$ e $HX + Y = H + XY$, onde $X, Y = F, Cl$, ou Br , com $X \neq Y$. Um estudo de base criterioso foi realizado para definir a melhor base para determinação da estrutura de transição e das energias, baseados nas entalpias de reação, quando comparadas com dados de referência. As energias foram calculadas em CCSD(T) e as geometria foram otimizadas em MP2, três bases diferentes foram utilizadas para calcular as geometrias das estruturas de transição (6-61g(d), 6-311++g(d,p) e aug-cc-pvtz), e as energias são calculadas em dezoito bases diferentes. As diferenças nas geometrias, frequências serão discutidas e comparadas com dados de referências, e no caso dos reagentes/produtos também discutiremos as diferenças no calor de formação a 0K, importante para o cálculo do calor de reação. Nós escrevemos nosso próprio programa para calcular a taxa de reação, caminho de mínima energia e colocamos nossos resultados na forma de Arrhenius. Várias correções de tunelamento são usadas no programa. Nós também incluímos os níveis rovibracionais dos reagentes e dos produtos nos cálculos da taxa. Este resumo foi aceito para apresentação como pôster no Congresso de químicos teóricos de Expressão Latina (QUITEL2015) a ser realizada de 26-31 julho de 2015 em Turim, Itália.

¹ Aluno do Curso de Matemática Computacional – Email: henriqueuclides@gmail.com

² Pesquisadora de Química Quântica Computacional – Email: patricia@plasma.inpe.br