



## **MECANISMO E SELETIVIDADE DE REAÇÕES QUÍMICAS: METODOLOGIA ESTÁTICA E DINÂMICA**

**Samila da Silva Gabriel<sup>1</sup>, Ezequiel Fragoso V. Leitão<sup>2</sup>**

### **RESUMO**

Neste projeto, foram investigados os mecanismos das reações entre o  $O_3 + X$  (em que,  $X = H, Cl, OH, NO$  e  $NH_2$ ). As reações são do tipo proibida por spin, caracterizadas por mais de uma superfície de energia potencial, ocorrendo mudança entre os estados de spin dubleto e quarteto, conseqüentemente originando dois caminhos para formação de diferentes produtos. Os métodos de estrutura eletrônica foram usados na determinação de pontos estacionários, coordenada intrínseca da reação, otimização e frequência das moléculas, densidade de spin e a mudança de estado de spin que influencia na formação dos produtos. Os pontos de análise foram o de controle cinético e termodinâmico na formação dos produtos ao longo dos perfis das energias potenciais, determinando a formação dos produtos majoritários.

**Palavras-chave:** Proibida por spin, estado de spin, perfis de energias potenciais.

---

<sup>1</sup> Aluna de Química, Unidade Acadêmica de Ciências Exatas e da Natureza, UFCG, Cajazeiras, PB, e-mail: samila.sgabriel@gmail.com

<sup>2</sup> Doutorado, Professor, Unidade Acadêmica de Ciências Exatas e da Natureza, UFCG, Cajazeiras, PB, e-mail: fq.ezequiel@gmail.com



**CHEMICAL REACTION MECHANISM AND SELECTIVITY: METHODOLOGY  
STATIC AND DYNAMIC**

**ABSTRACT**

In this project, the control mechanism between  $(O_3) + X$  (where  $X = H, Cl, OH, NO$  and  $NH_2$ ) were investigated. The reactions are of the type forbidden by spin, characterized by more than one surface of potential energy, occurring change between the state of spin doublet and quartet, consequently giving rise to two paths for formation of different products. The electronic structure methods were used in the determination of stationary points, intrinsic reaction coordinate, optimization and frequency of the molecules, spin density and the spin state change that influences the formation of the products. The points of analysis were the kinetic and thermodynamic control in the formation of the products along the potential energy profiles, determining the formation of the majority products.

**Keywords:** Forbidden by spin, spin state, potential energy profiles.