



ESTUDO COMPUTACIONAL DO MECANISMO E DA SELETIVIDADE DE REAÇÕES QUÍMICAS

Jessica Rodrigues Alves ¹, Ezequiel Fragoso Vieira Leitão ²

RESUMO

Este projeto faz uso das ferramentas computacionais com o objetivo de estudar o mecanismo das reações $O_2^{\cdot-} + CH_3X$ (em que, $X = F, Cl$ e Br). O estudo dessas reações são fundamentais na elucidação da maneira como o radical livre superóxido pode reagir com haletos de metila. Através da caracterização dos pontos estacionários (mínimos e máximos) foi possível construir o perfil de energia potencial. Nos dois métodos de estrutura eletrônica utilizados (a saber, B3LYP e B2PLYP) foi possível identificar a etapa determinante da reação química, que corresponde ao estado de transição, onde ocorre a quebra da ligação entre o haleto e o carbono da metila e simultaneamente a formação da ligação do O_2 no carbono da metila. No entanto, para a reação $O_2^{\cdot-} + CH_3Br$ apenas com o método B2PLYP foi possível caracterizar o seu respectivo estado de transição. A partir da análise dos perfis de energia potencial das três reações a ordem de estabilidade dos pontos estacionários cresce na medida que o raio do haleto aumenta. A diminuição das energias relativas dos pontos estacionários ocorre como uma consequência da capacidade do haleto em estabilizar a sua carga negativa.

Palavras-chave: Mecanismo, reação química, pontos estacionários.

¹Aluna do curso de Licenciatura em química, da UFCG, Campina Grande, PB, campus cajazeiras. jessica.r.alves27@gmail.com

²Doutor, Professor do Centro de Formação de Professores, Unidade Acadêmica de Ciências Exatas e da Natureza, Universidade Federal de Campina Grande, Campus Cajazeiras. fq.ezequiel@gmail.com



COMPUTATIONAL STUDY OF THE MECHANISM AND SELECTIVITY OF CHEMICAL REACTIONS

ABSTRACT

This project makes use of computational tools in order to study the mechanism of $O_2^{\cdot-} + CH_3X$ reactions (where, $X = F, Cl$ and Br). The study of these reactions is essential in elucidating how the superoxide free radical can react with methyl halides. Through the characterization of the stationary points (minimum and maximum) it was possible to build the profile of potential energy. In the two electronic structure methods used (namely, B3LYP and B2PLYP) it was possible to identify the determinant step of the chemical reaction, which corresponds to the transition state, where the break between the halide and the methyl carbon occurs and the formation of the bond of O_2 on methyl carbon. However, for the $O_2^{\cdot-} + CH_3Br$ reaction only with the B2PLYP method it was possible to characterize its respective transition state. From the analysis of the potential energy profiles of the three reactions, the order of stability of the stationary points increases as the radius of the halide increases. The decrease in the relative energies of the stationary points occurs as a consequence of the halide's ability to stabilize its negative charge.

Keywords: Mechanism, chemical reaction, stationary points