



ESTUDO TEÓRICO DE REAÇÕES QUÍMICAS BIMOLECULARES COM O SUPERÓXIDO

Jessica Rodrigues Alves¹, Ezequiel Fragoso Vieira Leitão ²

RESUMO

O perfil de energia potencial é um conceito essencial para estudos de reações químicas, pois, após a sua análise, obtêm-se informações importantes, como a caracterização de pontos estacionários, a saber: o(s) reagente(s), produto(s), intermediário(s) e o(s) estado(s) de transição. Neste trabalho, foi caracterizado os pontos estacionários de quatro reações químicas com a metodologia estática para explicitar o caminho de reação associado à interpretação desses pontos estacionários, ou seja, em termos de suas geometrias, energias e frequências vibracionais. Neste contexto, o objetivo deste projeto de pesquisa está no estudo do mecanismo de várias reações químicas bimoleculares em fase gasosa usando a relação entre a energia e a estrutura molecular. As reações de substituição nucleofílica de segunda ordem investigadas envolve o íon-radical superóxido ($O_2^{\cdot-}$) como nucleófilo e o substrato CH_3X (onde, $X = OH, SH, NH_2$ ou PH_2). Para obter a relação estrutura-energia sobre a seletividade da cada reação química foi utilizado o método B3LYP com a função de base 6-31+G(d,p). A partir dos perfis de energia potencial foi possível verificar que o mecanismo de substituição nucleofílica com o superóxido envolve uma alta barreira de ativação para estas reações e, portanto a formação do produto O_2CH_3 com a saída do grupo abandonador é inviável de acontecer em fase gasosa.

Palavras-chave: reações, mecanismo, energia.

¹Jéssica Rodrigues Alves, Unidade Acadêmica de Ciências Exatas e da Natureza, UFCG, Cajazeiras, PB, e-mail: jessica.alves@estudante.ufcg.edu.br

²Doutor, professor, Unidade Acadêmica de Ciências Exatas e da Natureza, UFCG, Cajazeiras, PB, e-mail: fq.ezequiel@gmail.com



THEORETICAL STUDY OF BIMOLECULAR CHEMICAL REACTIONS WITH SUPEROXIDE

ABSTRACT

The potential energy profile is an essential concept for chemical reaction studies, as, after its analysis, important information is obtained, such as the characterization of stationary points, namely: the reagent(s), product(s), intermediate(s) and the transition state(s). In this work, the stationary points of four chemical reactions were characterized with static methodology to explain the reaction path associated with the interpretation of these stationary points, that is, in terms of their geometry, energies and vibrational frequencies. In this context, the aim of this research project is to study the mechanism of various bimolecular chemical reactions in gas phase using the relationship between energy and molecular structure. The second order nucleophilic substitution reactions investigated involve the superoxide radical ion ($O_2^{\cdot-}$) as the nucleophile and the substrate CH_3X (where, $X = OH, SH, NH_2$ or PH_2). To obtain the structure-energy relationship on the selectivity of each chemical reaction, the B3LYP method was used with the base function 6-31+G(d,p). From the potential energy profiles it was possible to verify that the nucleophilic substitution mechanism with the superoxide involves a high activation barrier for these reactions and, therefore, the formation of the O_2CH_3 product with the leaving group is not feasible to happen in the gas phase.

Keywords: reactions, mechanism, energy.