



ESTUDO QUÂNTICO COMPUTACIONAL DO MECANISMO DE REAÇÃO ENTRE O ÍON FLUORETO MICROSSOLVATO E O METANOATO DE METILA

Jessica Rodrigues Alves¹, Ezequiel Fragoso Vieira Leitão²

RESUMO

A relação entre reatividade química, estrutura molecular e energia é feita a partir da caracterização de pontos estacionários, que é essencial na investigação dos caminhos reativos de reações químicas. Nesse contexto, este trabalho científico tem por objetivo fomentar o efeito da microsolvatação sobre o mecanismo da reação química em fase gasosa para compreender como o solvente pode alterar as estruturas moleculares utilizadas na caracterização do perfil de energia potencial e consequentemente mudar a reatividade dos caminhos de reação. Para isso, foi utilizada a metodologia estática para prever a seletividade química e dar continuidade na compreensão do efeito do solvente sobre reação química íon-molécula. A reação do ânion fluoreto com o metanoato de metila foi escolhida uma vez que dois caminhos de reação são possíveis de ocorrer com a energia termal, a saber: (i) eliminação do CO e formação do fluoreto hidratado pelo metanol (F^- ($HOCH_3$)), também chamada de reação de Riveros e (ii) substituição nucleofílica de segunda ordem que desloca a espécie $HCOO^-$. Trabalhos experimentais fazendo uso da espectroscopia de massas mostram que a distribuição desses produtos é de 92% e 8% para o F^- ($HOCH_3$) e $HCOO^-$, respectivamente. Porém, as mudanças na estimativa da formação desses produtos em solução ainda não foram reveladas. Portanto, a aplicação deste projeto de pesquisa se justifica uma vez que poderá oferecer o conhecimento a nível atômico/molecular sobre a extensão do papel do solvente na reatividade intrínseca e nos resultados da distribuição de produtos químicos bem conhecidos.

Palavras-chave: Reação íon-molécula, estrutura molecular, solvente e seletividade química.

¹Jessica Rodrigues Alves, Licenciatura em química, Departamento Universidade Federal de Campina Grande, PB, e-mail: jessica.r.alves27@gmail.com

²Ezequiel Fragoso Vieira Leitão, Orientador, Universidade Federal Campina Grande, PB, e-mail: fq.ezequiel@gmail.com



**COMPUTATIONAL QUANTUM STUDY OF THE REACTION MECHANISM
BETWEEN MICROSSOLVATE FLUORIDE ION AND METHYL METHANOATE**

ABSTRACT

The relationship between chemical reactivity, molecular structure and energy is made from the characterization of stationary points, and is essential in the investigation of the reactive pathways of chemical reactions. In this context, this scientific project aimed to promote the effect of microsolvation on the mechanism of chemical reaction in gas phase to understand how the solvent can alter the molecular structures used in the characterization of the potential energy profile and consequently change the reaction pathability reaction. For this, the static methodology was used to predict chemical selectivity and to continue the understanding of the effect of the solvent on chemical ion-molecule reaction. The reaction of fluoride anion with methyl methanate was chosen since two reaction paths are possible to occur with thermal energy, namely: (i) elimination of CO and formation of fluoride hydrated by methanol (F^- ($HOCH_3$)), also called riveros reaction and (ii) second-order nucleophilic substitution that displaces the $HCOO^-$ species. Experimental studies using mass spectroscopy show that the distribution of these products is 92% and 8% for F^- ($HOCH_3$) and $HCOO^-$, respectively. However, the changes in the estimation of the formation of these products in solution have not yet been revealed. Therefore, the application of this research project is justified since it can offer knowledge at the atomic/molecular level about the extent of the role of the solvent in intrinsic reactivity and in the results of the distribution of well-known chemicals.

Keywords: Ion-molecule reaction, molecular structure, solvent and chemical selectivity