

E386

### **ANÁLISE TEÓRICA CONFORMACIONAL DAS ESPÉCIES PRESENTES NA REAÇÃO EM FASE GASOSA ENTRE SF<sub>6</sub> E KR<sup>+</sup>**

André Luiz Fre Le Petit Ramos (Bolsista Projeto de Pesquisa/CNPq) e Prof. Dr. Nelson Henrique Morgon (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

Estudos modernos de reações químicas, que são importantes para o processamento de plasma, requerem uma combinação de pesquisas experimental e teórica. Um exemplo, é o presente trabalho. O SF<sub>6</sub> é um gás eletronegativo muito importante em vários desenvolvimentos de processos que envolvem plasma. Apesar disso, ainda existem consideráveis incertezas, por exemplo, na termoquímica de íons SF<sub>6</sub><sup>+</sup> que podem ser derivados de SF<sub>6</sub>, e mesmo em reações íon/molécula envolvendo o próprio SF<sub>6</sub>. Estas incertezas têm dificultado a interpretação dos resultados experimentais em reações de íons positivos com SF<sub>6</sub>. Para muitas reações, não é claro se as reações ocorrem por um mecanismo simples ou por um mecanismo "químico", envolvendo a formação de uma nova ligação. Um primeiro passo na interpretação dos aspectos energéticos, refere-se à obtenção de informações conformacionais das espécies presentes na reação. Cálculos de estrutura eletrônica do tipo MP2/6-31+G(d) foram efetuados. No estudo teórico global da reação observou-se que no processo reacional a transferência da carga entre o íon Kr<sup>+</sup> e o SF<sub>6</sub> ocorre através da formação de um complexo [SF<sub>6</sub>...Kr]<sup>+</sup>, e posterior formação de produtos. Através dos resultados obtidos verificou-se que a estrutura do íon SF<sub>5</sub><sup>+</sup> é bipirâmide trigonal, sendo aproximadamente 5 kcal/mol mais estável que a correspondente forma piramidal.

Reações em Fase Gasosa – Análise Conformacional – Cálculos Teóricos