

E387

ANÁLISE TEÓRICA DA REAÇÃO ÍON/MOLÉCULA EM FASE GASOSA: $\text{CF}_3^-/\text{SeF}_6$

Daniel Quarentei Rossini (Bolsista Projeto de Pesquisa/CNPq) e Prof. Dr. Nelson Henrique Morgon (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

Neste trabalho fizemos uma análise teórica da reação íon/molécula em fase gasosa através do estudo da estrutura eletrônica das espécies envolvidas nesta reação, considerando dois possíveis mecanismos:



Os cálculos foram obtidos utilizando-se o programa Gaussian/98, considerando-se o modelo de Hartree-Fock com funções de base 6-31+G(d). Otimizou-se as geometrias de das espécies presentes nas reações (A) e (B). Nas geometrias otimizadas, efetuou-se cálculos de frequências vibracionais, que permitem caracterizar os mínimos da superfície de potencial e fazer correções térmicas. Com os dados obtidos, foi possível propor um mecanismo reacional, bem como determinar as estruturas moleculares das espécies. As energias eletrônicas (em unidades atômicas) e as geometrias (entre parênteses) para as moléculas presentes nas reações (A) e (B) são: CF_3^- (piramidal) = -336,1601; SeF_6 (octaédrica) = -2994,1600; SeF_6^- (octaédrica) = -2994,2162; CF_3 (piramidal) = -336,1447; SeF_5^- (pirâmide de base) = -2894,8415; CF_4 (tetraédrica) = -435,6580. A partir destes valores de energia e com as respectivas correções térmicas (para 25°C), obteve-se as variações de entalpia entre produtos e reagentes: $\Delta_r H_A$ (298K) = -29,19 kcal/mol e $\Delta_r H_B$ (298K) = -111,48 kcal/mol, indicando ser o mecanismo (B) o mais favorecido energeticamente. Cálculos mais rigorosos incluindo efeitos de correlação eletrônica estão em andamento.

Reações Íon/Molécula - Cálculos Teóricos - Mecanismo de Reação