

ESTUDO DA TEORIA DE TRANSIÇÃO VARIACIONAL PARA SISTEMAS DE INTERESSE AMBIENTAL

Henrique de Oliveira Euclides¹ (UNIFESP, Bolsista PIBIC/CNPq)
Patrícia R. P. Barreto² (LAP/INPE, Orientadora)

RESUMO

Este trabalho, tem como objetivo a continuidade ao projeto de Iniciação Científica em desenvolvimento desde março de 2013. Para esta etapa do projeto, apresentamos a parte gráfica do programa que calcula taxa de reação. O programa foi nomeado APUAMA, que vem do tupi-guarani e significa “veloz”, pois calcula velocidades de reação de forma rápida e prática. Nessa versão do programa, desenvolvida no QT, portamos todos os cálculos que fazíamos anteriormente, como as correções de tunelamento, os espectros rovibracionais por Dunham, a apresentação da taxa na forma de Arrhenius. Como saída do programa, temos arquivos texto com informações tabeladas da taxa, os níveis rovibracionais, barreiras de energia, entre outros dados importantes, e também damos a opção ao usuário salvar em arquivo de imagem alguns gráficos, como da taxa, MEP (caminho de mínima energia). Os dados de entrada são definidos em modo texto, para os reagentes, produtos, estrutura de transição, no que se referem à geometria, modos vibracionais e energias. O código APUAMA roda em ambiente Windows em Linux, podendo ainda criar executável que possam ser instalados em diferentes máquinas.

¹Aluno do Curso de Matemática Computacional – E-mail: henriqueuclides@gmail.com

²Pesquisadora de Química Quântica Computacional – E-mail: patricia.barreto@inpe.br