

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, iniciado em agosto de 2013, tem como objetivo a continuidade ao projeto de Iniciação Científica em desenvolvimento desde março de 2013, para obtenção e correção da taxa de reação de um sistema de reagentes, com a correção de tunelamento de pequena curvatura, correção usando coeficiente de transmissão de Wigner e Eckart, e posteriormente a taxa é apresentada na forma de Arrhenius. Inicialmente o trabalho feito no início de 2013 tratou do desenvolvimento do algoritmo da taxa de reação em linguagem C, onde implementamos varias correções afim de obter uma melhor representação da taxa. Para diversos sistemas reativos foi determinada a taxa de reação, em alguns casos, ao compararmos com dados experimentais observamos alguns desvios que precisam ser corrigidos. O trabalho atual trata de refinar o programa da taxa afim de corrigir esses desvios. Em sistemas poliatômicos, é comum encontrar os movimentos vibracionais e rotacionais, eles geram um aumento da energia eletrônica que deve ser incluído nos reagentes, produtos e/ou estrutura de transição caso estejam num estado rovibracional elevado. Começamos a estudar o método de Dunham que é baseado em fórmulas derivadas da teoria da perturbação, no qual o potencial é expandido em uma série de Taylor em torno da distancia de equilíbrio (distancia do centro de massa da molécula). Este método permite encontrar as constantes espectroscópicas (harmônicas e anarmônicas) e descrever o espectro rovibracional das moléculas. De posse desses dados conseguimos incluir esses níveis rovibracionais quando necessário, e analisamos uma melhor correção da representação teoria da taxa de reação.

¹Aluno do Curso de Matemática Computacional – Email: henriqueuclides@gmail.com

²Pesquisadora de Química Quântica Computacional – Email: patricia@plasma.inpe.br