

SESSÃO DE QUÍMICA, FÍSICA E MATEMÁTICA

RESUMO

TÍTULO Modelación de la degradación del 2-cloro-metil-propeno por la acción del radical cloro.

Nome do Estudante

Denis Profirio Viveros Rodas
Ingenieria de Energias Renovables
bolsa pibic UNILA
dennis_prog@hotmail.com

Nome do Orientador

Juan de Dios Gariido Arrate
Professor Adjunto/Visitante
Instituto Latino-Americano Ciencias de la Vida y Naturaleza
garrido.jd@gmail.com

Resumo: No presente trabalho foi pesquisada a degradação do composto orgânico volátil 2-cloro-metil-propeno produzida pela reação com átomos de cloro. Foram determinadas duas estruturas de mínimos que garantem a possibilidade da reação do átomo de cloro com os átomos de carbono da ligação dupla. No trabalho são reportadas as geometrias e frequências dos modos normais de vibração dos estados estacionários correspondentes. Foi pesquisada a possível existência de estados de transição vinculados aos mínimos determinados. Para determinar esses estados estacionários foi mapeado o espaço de configuração da molécula, junto com o átomo de cloro, na região das redondezas dos mínimos determinados utilizando cálculos pontuais de energia e otimizações das configurações geométricas prováveis. No foi encontrado nenhum estado de transição associado aos mínimos determinados. O resultado reportado parece indicar que o átomo de cloro entra no poço de potencial do mínimo sem passar por estado de transição. Esse tipo de comportamento tem sido observado em outras reações.

Agradecemos à UNILA pela bolsa de iniciação científica concedida.

Palavras-chave : Cloro, modelage, compuestos organicos volatiles