

A. Ciências Exatas e da Terra - 3. Física - 3. Física Atômica e Molecular

ESTUDO DO PROCESSO DE MUDANÇA DE QUIRALIDADE POR TORÇÃO EM TORNO DAS LIGAÇÕES O-O, S-S E O-S

Beliato Santana Campos ¹

Ana Carla Peixoto Bitencourt ¹

Mirco Ragni ²

1. Universidade Federal do Recôncavo da Bahia

2. Universidade Federal da Bahia

INTRODUÇÃO:

O presente trabalho consiste no tratamento quantum-mecânico de processos moleculares e representa uma parte importante na compreensão dos fenômenos atômicos e moleculares elementares. O objetivo principal aqui é fornecer informações adicionais sobre o processo de mudança de quiralidade em torno das ligações O-O, S-S e O-S dos sistemas HOOH, HOOD, HSSH e HOSH. O modo torcional é associado ao diedro e em geral é aquele que apresenta vibração de grande amplitude.

METODOLOGIA:

Em primeira aproximação, para moléculas como ROOR \square , pode-se resolver o modo torcional para o estudo de mudança de quiralidade separadamente dos outros modos internos. Os cálculos da estrutura molecular, dos modos normais de vibração e das curvas de energia potencial em função do diedro foram realizados usando a Teoria do Funcional de Densidade. Tais cálculos foram efetuados usando os programas Gamess e Gaussian. Os sistemas moleculares HOOH e HOOD foram descritos usando coordenadas ortogonais de Jacobi diátomo-diátomo para o cálculo dos níveis de energias torcionais e rotacionais. Os sistemas HSSH e HOSH foram estudados usando coordenadas de valência, pois as coordenadas de Jacobi diátomo-diátomo não apresentaram uma boa descrição do caminho de mínima energia. Para os sistemas HOOH e HOOD foram calculados os níveis de energia torcional, bem como o tempo de racemização por tunelamento da barreira trans foi estimado.

RESULTADOS:

Outro aspecto deste trabalho é o estudo das rotações externas da molécula HOOH usando a aproximação \square asymmetric top \square para a determinação dos valores esperados das constantes rotacionais e dos níveis de energia rotacional. Verificou-se que as coordenadas ortogonais minimizam a variação do momento de inércia em função do ângulo diedro, e simplificam o cálculo dos níveis rotacionais.

CONCLUSÃO:

Assim, foi possível introduzir as inércias médias no operador energia rotacional permitindo o cálculo a partir de fórmulas analíticas. Os níveis de energia associados com a mudança de quiralidade por torção das moléculas citadas, bem como os níveis de energia rotacional e os valores esperados para as constantes rotacionais estão em concordância com outros resultados disponíveis na literatura.

Instituição de Fomento: PIBIC

Palavras-chave: Quiralidade, Coordenadas , ortogonais.