

**A. Ciências Exatas e da Terra - 4. Química - 1. Físico-Química**

**BROMAÇÃO DO FERRO-PDC: PROPOSTA DE MECANISMO**

Juliana de Oliveira Silva<sup>1</sup>

Felipe de Almeida La Porta<sup>2</sup>

Teodorico de Castro Ramalho<sup>3</sup>

Mário César Guerreiro<sup>4</sup>

1. Graduanda em Química-DQI-UFLA

2. Doutorando em Química-UNESP

3. Professor-DQI-UFLA-Orientador

4. Professor-DQI-UFLA-Co-Orientador

RESUMO:

O aumento da atividade industrial e o desenvolvimento de novos produtos químicos têm melhorado significativamente a qualidade de vida da população e o avanço de outros setores como agricultura, transporte, saúde, etc. Tratando-se da degradação de corantes, o complexo Ferro-PDC tem sido utilizado como catalisador homogêneo por ser especialmente ativo nas reações de oxidação em meio aquoso. Dessa forma, esta pesquisa consiste no estudo teórico deste referido catalisador para verificar sua estabilidade quando sofre substituição eletrofílica com bromo em sua estrutura. Além disso, será proposto o mecanismo de reação a fim de se obter um catalisador mais estável e que proporcionará uma reação mais rápida e eficaz. A pesquisa foi desenvolvida no Laboratório CAPQ do Bloco I do Departamento de Química da UFLA. Todos os cálculos realizados neste trabalho foram feitos utilizando o programa Gaussian 98. Para os cálculos de otimização e energia utilizou-se o método ab-initio DFT a nível B3LYP com função de base 6-31g(d,p). Os resultados teóricos de energia obtidos possibilitaram a formulação e proposta de mecanismo da bromação total do complexo Ferro-PDC.

Instituição de Fomento: FAPEMIG

Palavras-chave: Ferro-PDC, Catálise, Bromo.