

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

ESTUDO TEÓRICO DA REATIVIDADE QUÍMICA

Régis Tadeu Santiago¹
Teodorico de Castro Ramalho²
Matheus Puggina de Freitas³
Felipe de Almeida La Porta⁴
Marcus Vinícius Juliaci Rocha⁵

1. Graduando em Química - bolsista PIBIC/CNPq- UFLA
2. Prof. Dr. - Departamento de Química - UFLA
3. Prof. Dr. - Departamento de Química - UFLA
4. Doutorando em Química - UNESP
5. Doutorando em Agroquímica - UFLA

RESUMO:

Os orbitais moleculares e suas propriedades, como energia e simetria, são muito importantes para a química. A energia dos orbitais esta relacionada com o comportamento ácido-base dos compostos, devido à disponibilidade dos pares de elétrons. Assim, o presente trabalho teve como objetivo estabelecer uma relação entre a reatividade e os orbitais moleculares de uma série de fosfinas orgânicas. O estudo foi realizado no Laboratório de Química Computacional da UFLA. Para os cálculos de otimização e frequência utilizou-se o método ab-initio DFT a nível B3LYP com função de base 6-311g(d,p) e os cálculos de orbitais foram feitos utilizando o método ab-initio MP2 com função de base 6-311g(d,p). Aos resultados, foram aplicados métodos estatísticos e matemáticos para o tratamento dos dados. Desta forma, os dados obtidos por essas técnicas quimiométricas nos ajudaram a relacionar os orbitais moleculares com a reatividade dos compostos estudados.

Instituição de Fomento: CNPq

Palavras-chave: Reatividade, orbital molecular, quimiometria.