



Teoria do Estado de Transição Aplicada a Reação de Abstração do Átomo de Hidrogênio do Silano pelo Radical Metil: Constantes de Velocidade e Efeito Isotópicos

Filipe G. Kano¹, Francisco B. C. Machado¹, Orlando R. Neto²

1. Instituto Tecnológico de Aeronáutica – ITA, São José dos Campos, Brasil, kanofilipe@gmail.com
2. Instituto de Estudos Avançados – IEAv, São José dos Campos, Brasil.

O silano (SiH_4) é um gás incolor classificado como perigoso pela European GHS Classification and Labelling. Entretanto, de acordo com a Global Market Insights (GMI), o mercado do silano em 2020 foi de aproximadamente 2.37 bilhões de dólares e apresentará uma taxa de crescimento de aproximadamente 7.8% entre os anos de 2021 e 2027. Muito utilizado como material percurso em síntese de nanopartículas e revestimento que contenha silício (Si), o silano possui inúmeras aplicações nos setores industriais. No setor aeronáutico tem sido proposto como fonte de ignição para foguetes do tipo scramjets. Por causa dos riscos e da importância do silano, a elucidação de seus mecanismos de oxidação é de extrema importância e tem sido foco de inúmeros estudos experimentais e teóricos. Neste trabalho, o principal objetivo é investigar teoricamente a cinética da reação de abstração $\text{SiH}_4 + \cdot\text{CH}_3$ através de química computacional. Para isso, precisamos efetuar cálculos de estrutura eletrônica de todas as espécies químicas envolvidas (reagentes, produtos e estado de transição), construir a superfície de energia potencial (SEP), aplicar a Teoria do Estado de Transição e calcular as constantes de velocidade em função da temperatura. Os cálculos de estrutura eletrônica são essenciais para a caracterização das geometrias, frequências vibracionais e energia eletrônica de todas as espécies, e são obtidas resolvendo a equação de Schroedinger. Elas são primordiais para a construção da superfície de energia potencial (SEP) na qual caracteriza a dinâmica química do sistema. Para obter as constantes de velocidade que caracterizam a cinética da reação, aplicamos a Teoria Variacional do Estado de Transição (TVET). A metodologia empregada nesse estudo foi: 1) Utilização de métodos aproximativos da equação Schroedinger sendo eles o método de função de onda e Teoria do Funcional Densidade (DFT), 2) Estratégia Duo – Level, na qual consiste em utilizar duas metodologias de cálculo de estrutura eletrônica, afim de diminuir o custo computacional, para a determinação da SEP e 3) Aplicação da TVET com correções de tunelamento - que são essenciais em sistemas que apresentam superfícies de energia potencial - para o cálculo das constantes de velocidade no intervalo de temperatura 200 – 2000 K. Os resultados obtidos com essa metodologia estão em excelente acordo com os poucos resultados experimentais encontrados na literatura para a reação.