



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2015: SIC - XXVII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2015
<b>Local</b>	Porto Alegre - RS
<b>Título</b>	Resumo
<b>Autor</b>	BRUNO MARTINI PASCOTTINI
<b>Orientador</b>	PAULO FERNANDO BRUNO GONCALVES

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Projeto: Estudo Teórico de Reações em Superfícies Contendo Metais de Transição com Aplicação em Células Solares

Bolsista: Bruno Martini Pascottini

Orientador: Prof. Dr. Paulo F. B. Gonçalves.

O CO<sub>2</sub> é um dos principais gases emitidos na atmosfera pela ação antropogênica. Apesar de sua presença ser importante, altas concentrações de CO<sub>2</sub> podem acarretar no aumento do efeito estufa com conseqüente aumento nas temperaturas médias, tornando-o um gás nocivo. Em função disso, medidas estão sendo tomadas para a redução das emissões desse gás assim como de sua captura e aplicação na indústria, pois ele pode ser visto como uma unidade de carbono para síntese orgânica.

Entretanto, devido à alta estabilidade química e termodinâmica do CO<sub>2</sub>, existe a necessidade de se utilizar reagentes altamente reativos e catalisadores. Um processo bastante promissor que tem sido investigado é o da cicloadição de CO<sub>2</sub> em epóxidos para a formação de carbonatos cíclicos. Os produtos da reação tem aplicabilidade como eletrólitos em baterias secundárias, monômeros de policarbonatos e poliuretanos, solventes polares apróticos e como matéria-prima para outras reações químicas.

Os líquidos iônicos, por sua vez, constituem uma classe de catalisadores que se enquadram na química verde em função de suas características como não volatilidade, não inflamabilidade, reciclabilidade, habilidade de solubilizar uma gama de compostos e seletividade. Sendo assim, eles se apresentam como uma excelente alternativa aos catalisadores usuais.

Este projeto se baseia na investigação mecanística computacional da reação de inserção do CO<sub>2</sub> em óxido de estireno, via cicloadição, para formar carbonato de estireno. A reação catalisada foi estudada utilizando-se líquidos iônicos do tipo haleto de 1-butil-3-metilimidazólio (BMIm X, X = Cl, Br ou I).

Para o estudo da reação, realizaram-se cálculos quânticos com base na Teoria do Funcional da Densidade (DFT) implementados no software Gaussian 09. Todas as estruturas foram otimizadas geometricamente e as estruturas de mínimo ou estado de transição foram confirmadas através de análise de frequência vibracional. A influência dos haletos nas energias de ativação foi investigada por meio do funcional  $\omega$ B97XD e da base 6-31G(d,p). Adicionalmente, empregaram-se outros quatro funcionais, B3LYP, CAM-B3LYP, M062X e PBE0 para avaliar a dependências das energias de ativação nos diferentes funcionais. Complementarmente, para cada funcional fez-se a adição de correções empíricas de dispersão átomo-átomo D3 segundo o esquema proposto por Grimme.

Através dos resultados obtidos até o momento foi possível verificar que o mecanismo de reação da inserção de CO<sub>2</sub> em óxido de estireno é constituído de três etapas, sendo a quebra do anel de três membros (primeira etapa) a mais energética. Verificou-se que a energia de ativação referente a essa etapa para a reação catalisada por BMIm Cl requer 3,41 kcal mol<sup>-1</sup> mais energia em relação à catalisada por BMIm Br enquanto que para o BMIm I essa diferença é de apenas 0,49 kcal mol<sup>-1</sup>, confirmando os resultados experimentais de que o BMIm Cl é o catalisador menos eficiente. Aditivamente, observou-se que as correções de dispersão são importantes para a descrição do mecanismo estudado.