

Estudo teórico de colisões reativas entre dois radicais NH

D.G. de Castro^{†1}, F.F. Abreu^{†2}, Ballester, M. Y.^{†3}

[†] Universidade Federal de Juiz de Fora, Minas Gerais, Brasil

Sinopse: O trabalho relata um estudo da dinâmica e cinética da reação caracterizando a superfície de energia

Os radicais NH são espécies altamente reativas que participam de diferentes processos na físico-química do plasma e da combustão [3]. Neste trabalho estudamos as colisões reativas entre dois radicais NH. Para isto, usamos a metodologia das trajetórias quase-clássicas (QCT) como implementada no código MERCURY [4] e uma superfície de energia potencial global para o N_2H_2 [1]. O canal reativo mais provável é o de formação de $N_2 + H + H$ seguido de $N_2H + H$. As seções de choque reativas são calculadas e fenomenologicamente modeladas [3]. Os cálculos clássicos permitem que sejam obtidos produtos como energias vibracionais abaixo da energia do ponto zero. Neste trabalho são utilizadas algumas metodologias para corrigir tais deficiências [2].

Referências

- [1] L. A. Poveda, M. Biczysko, and A. J. C. Varandas THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 131, 044309 2009
- [2] T. Stoecklin, C. E. Dateo and D. C. Clary*, J. CHEM. SOC. FARADAY TRANS., 1991, 87(11), 1667-1679.
- [3] M.Y. Ballester, A.J.C. Varandas, Chemical Physics Letters 433 (2007) 279–285
- [4] W. L. Hase, MERCURY: a general Monte-Carlo classical trajectory computer program, QCPE453. An updated version of this code is VENUS96; W. L. Hase, R. J. Duchovic, X. Hu, A. Komornik, K. F. Lim, D.-H. Lu, G. H. Peslherbe, K. N. Swamy, S. R. van de Linde, A. J. C. Varandas, H. Wang and R. J. Wolf, QCPE Bull, 1996, 16, 43.

¹E-mail: delvany@ice.ufjf.br

²E-mail: delvany@ice.ufjf.br

³E-mail: maikel.ballester@ufjf.edu.br