

Título	Análise do efeito de solvente sobre as componentes entálpica e entrópica associadas a reações de solvólise de halogenetos de alquilo terciário
Resumo	<p>A Teoria do Estado de Transição (TET) permite interpretar os fenómenos reativos em geral e, em particular, racionalizar do ponto de vista termodinâmico o efeito de solvente sobre a velocidade de uma reação. De acordo com a TET, um reagente evolui ao longo de uma coordenada reacional, refletindo este processo as suas mudanças estruturais e energéticas desde um estado inicial até um estado de transição, a que corresponde um nível energético mais alto, e a sua posterior evolução para produto. A barreira energética que separa os estados inicial e de transição traduz-se em termos macroscópicos na constante de velocidade da reação (k).</p> <p>A metodologia QSPR (Quantitative Structure-Property Relationships) constitui uma das mais poderosas técnicas usadas no estudo do efeito de solvente em processos físico-químicos. O principal objetivo da aplicação das QSPR é a obtenção de um modelo matemático que permita estabelecer uma relação quantitativa entre uma determinada propriedade de um sistema e um conjunto de descritores que codificam certas características associadas à estrutura dos compostos e relativamente aos quais a propriedade é medida.</p> <p>O Grupo de Estrutura e Reatividade (GER) do CQB tem-se dedicado à aplicação de QSPR ao estudo do efeito de solvente em reações de heterólise de halogenetos de alquilo terciários (HAT), correlacionando o $\log k$ de um determinado HAT (que é proporcional ao termo energético, $\Delta^\ddagger G$) com um conjunto de descritores de solvente bem estabelecidos. A referida metodologia tem permitido identificar e quantificar as principais interações soluto-solvente-solvente que influenciam esta classe de reações. Mais recentemente, o GER tem-se vindo a debruçar também sobre os aspetos dinâmicos associados à TET, desenvolvendo uma estratégia para quantificar os efeitos da mobilidade do solvente nas reações dos HAT. Este trabalho permitirá determinar experimentalmente um conjunto de resultados que vão possibilitar a quantificação do efeito do solvente sobre os termos entálpicos ($\Delta^\ddagger H$) e entrópicos ($\Delta^\ddagger S$) de uma reação de um HAT.</p>
Local de trabalho	FCUL, DQB, labs. 8.3.68 e 8.3.12
Orientador (es)	Filomena Martins e Luís Moreira
Informações	filomena.martins@ciencias.ulisboa.pt; lmoreira@ciencias.ulisboa.pt