

INVESTIGAÇÃO DO MECANISMO DE CATÁLISE ROMP DO NORBORNENO UTILIZANDO MÉTODOS DE FUNCIONAL DE DENSIDADE

Carlos Pereira da Silva\*

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Piauí, Campus Prof. Marcílio Rangel Farias, 64018-000 Teresina – PI, Brasil

Francisco das Chagas Alves Lima

Coordenação de Química, Universidade Estadual do Piauí, 64002-150 Teresina - PI, Brasil

Régis Casimiro Leal e José Machado Moita Neto

Departamento de Química, Centro de Ciências da Natureza, Universidade Federal do Piauí, 64049-550 Teresina - PI, Brasil

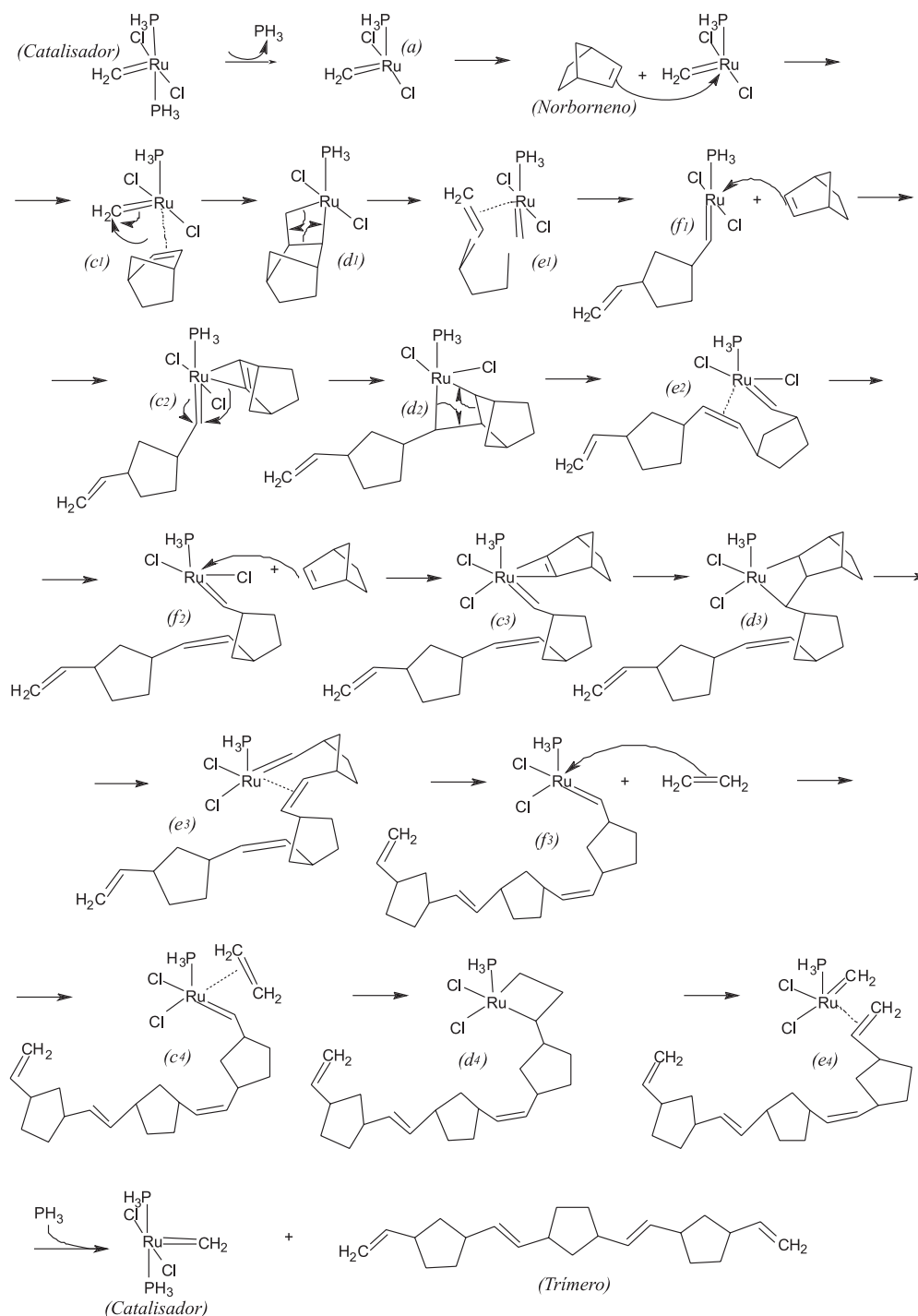


Figura 1S. Mecanismo proposto para trimerização do norborneno

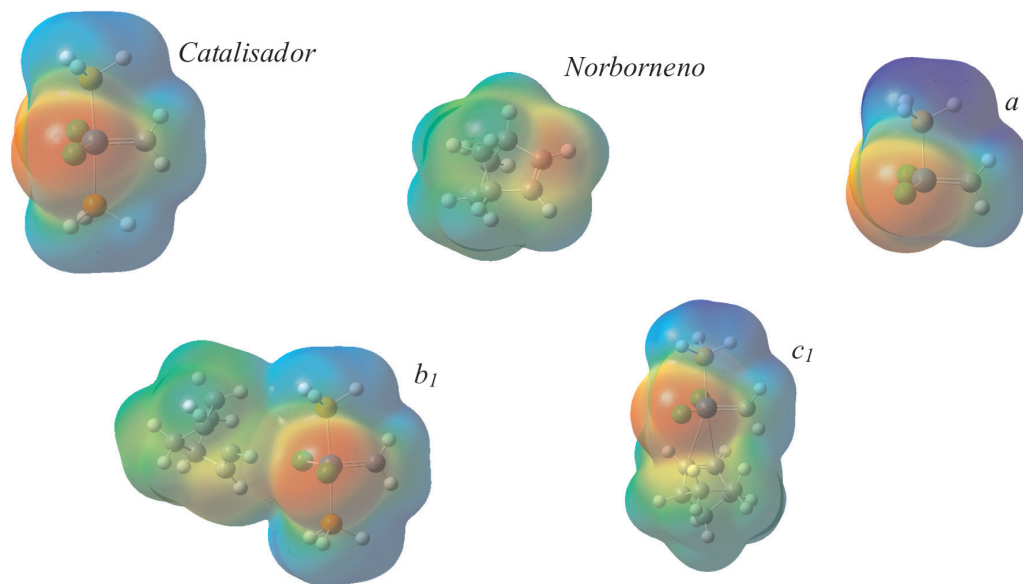


Figura 2S. SPE's calculadas (B3LYP/lan12dz) para espécies envolvidas na dissociação da fosfina (-+)

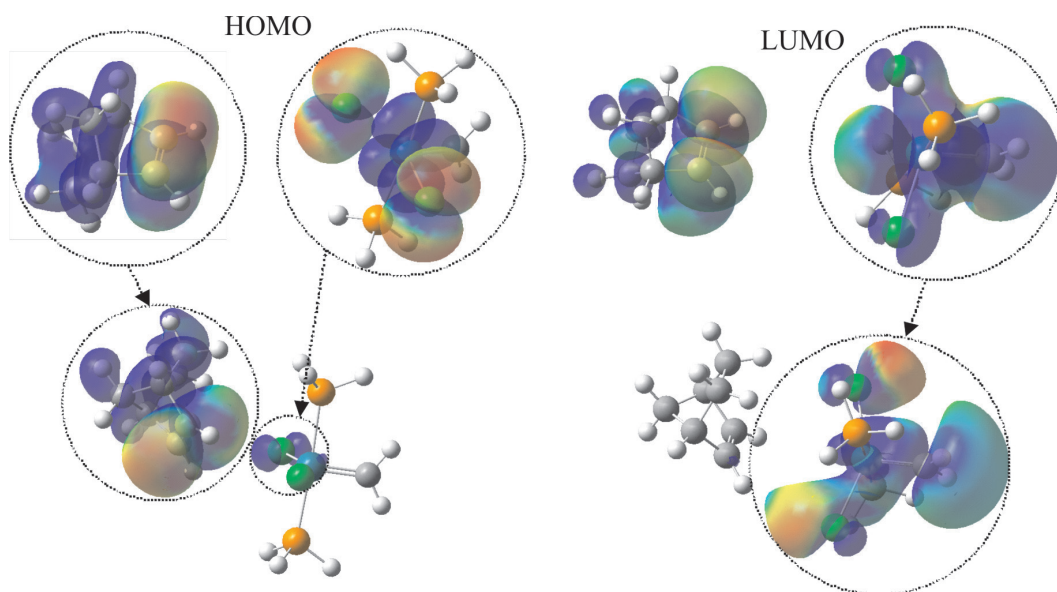
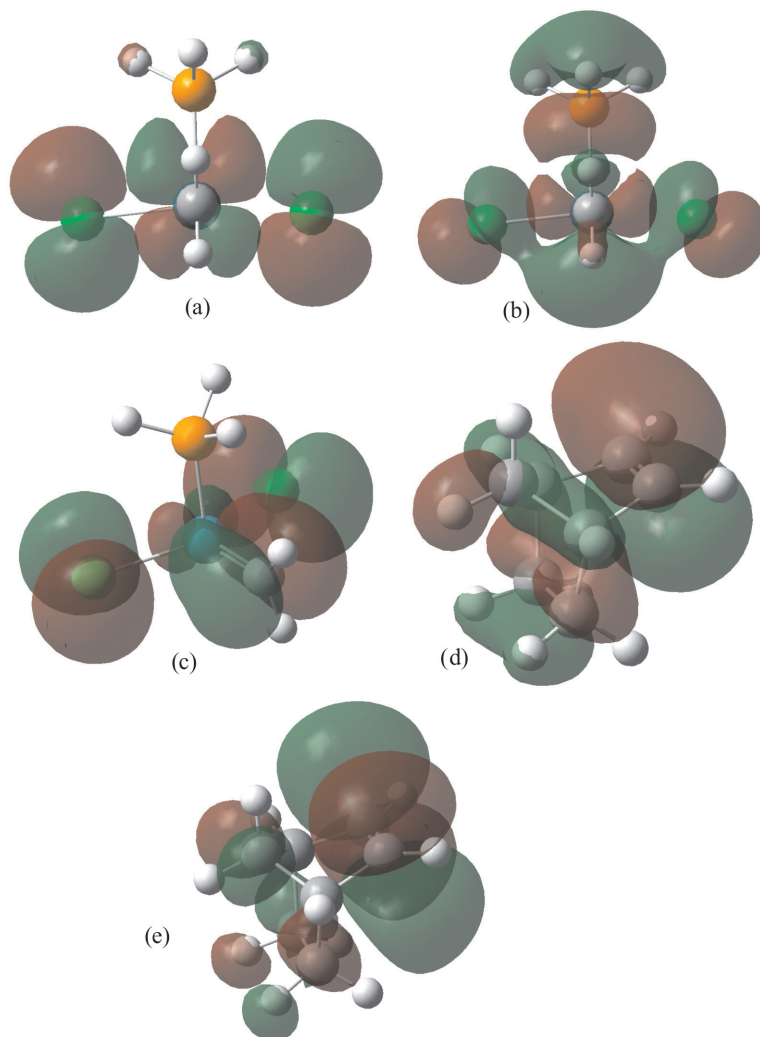
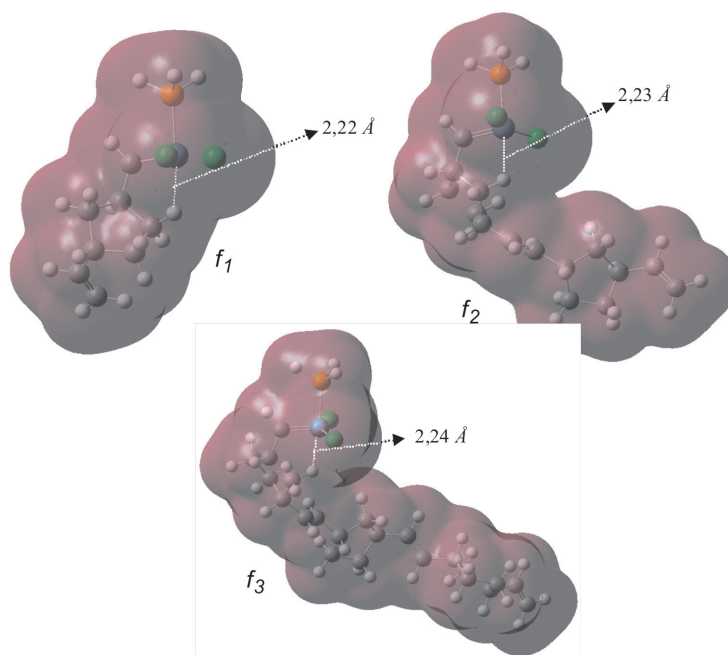


Figura 3S. Formação dos orbitais de fronteira HOMO e LUMO da estrutura *b<sub>1</sub>* (B3LYP/LANL2DZ) (-+)



**Figura 4S.** Orbitais de fronteira das estruturas "a" - LUMO (a), HOMO (b), e HOMO-1 (c); e norborneno -  $\pi$  (d) e  $\pi^*$  (e) (B3LYP/LANL2DZ)



**Figura 5S.** Densidades eletrônicas totais (B3LYP/lanl2dz) calculadas para as estruturas  $f_1$ ,  $f_2$  e  $f_3$