

## Estudo da Superfície de Energia Potencial do Tipo [H, Br, S<sub>2</sub>]

Antonio G. S. de Oliveira Filho\* (IC), Tiago V. Alves (PG), Fernando R. Ornellas (PQ).

\*oliveira@iq.usp.br.

Instituto de Química, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 26077, São Paulo 00513-970, Brasil.

Palavras Chave: CCSD(T), *ab initio*.

### Introdução

Embora em pequena quantidade na atmosfera, o bromo possui papel fundamental da destruição do ozônio estratosférico na forma de radicais ativos como Br e BrO [1]. Analogamente às reações conhecidas do bromo na atmosfera, neste trabalho propõe-se o estudo de compostos potencialmente envolvidos no acoplamento do ciclo do enxofre e bromo na atmosfera, bem como, na remoção do ozônio.

### Resultados e Discussão

A otimização de geometrias e o cálculo de frequências utilizaram como método de estrutura eletrônica a abordagem *coupled cluster* com excitações simples e duplas e contribuições perturbativas de excitações triplas conectadas, CCSD(T), em conjunto com as bases atômicas consistentes na correlação eletrônica, aug-cc-pVTZ, para os átomos de hidrogênio e bromo e para os átomos de enxofre foi utilizada uma base com funções *d* adicionais, aug-cc-pV(T+d)Z, para melhor descrever suas propriedades.

Para a investigação da conexão dos estados de transição com os mínimos de energia foram executados cálculos de coordenada intrínseca de reação (IRC) ao nível MP2/VTZ.

Na Figura 1 mostramos os dados estruturais correspondentes aos estados estacionários.

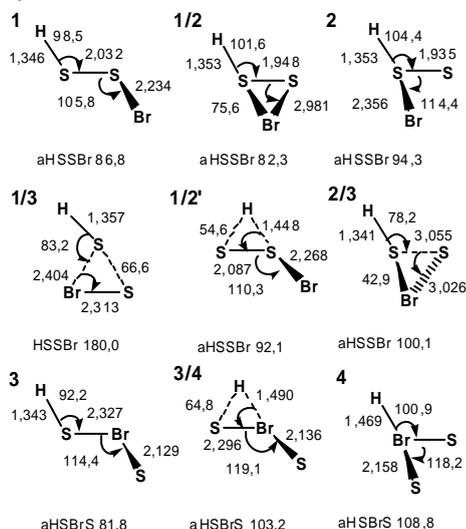


Figura 1. Geometrias otimizadas a CCSD(T)/aug-cc-pVTZ, distâncias em Å e ângulos em graus.

31ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

A Figura 2 contém o perfil energético da superfície de energia potencial, evidenciando a conexão entre seus pontos estacionários.

O isômero com uma ponte dissulfeto é o mais estável. Sua isomerização para uma forma quase piramidal, não observada para o análogo oxigenado, pode ocorrer via migração de hidrogênio ou bromo. Sendo a última um pouco menos energética.

Frequências vibracionais harmônicas foram também calculadas e devem contribuir para a caracterização experimental desses isômeros quando produzidos.

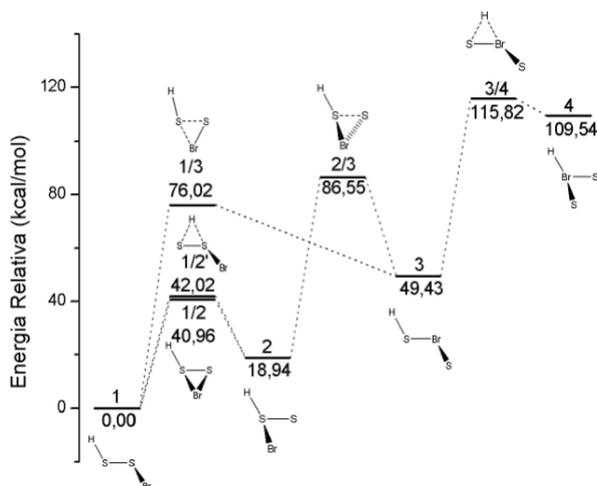


Figura 2. Perfil energético a CCSD(T)/aug-cc-pVTZ incluindo energia do ponto zero.

### Conclusões

Este trabalho identifica e caracteriza energética e vibracionalmente, utilizando métodos rigorosos de estrutura eletrônica e bases atômicas extensas, quatro isômeros e cinco estados de transições na superfície de energia potencial [H,Br,S<sub>2</sub>].

### Agradecimentos

À FAPESP (A.G.S.O.F. e F.R.O.) e ao CNPq (T.V.A. e F.R.O.) pelo apoio financeiro.

<sup>1</sup> Wolfsy, S. C.; McElroy, M. B.; Yung, Y. L. *Geophys. Res.Lett.* **1975**, *2*, 215.