

## A. Ciências Exatas e da Terra - 3. Física - 3. Física Atômica e Molecular

### Curvas adiabáticas em função do stretching O-O para a molécula H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> descrita em vetores de Jacobi.

Josenilton do Nascimento Sousa (1) <sup>1</sup>

Ana Carla P. Bitencourt (1) <sup>1</sup>

Mirco Ragni (2) <sup>2</sup>

1. Universidade Federal do Recôncavo da Bahia

2. Universidade Federal da Bahia

### INTRODUÇÃO:

Na literatura é bem estabelecido que a superfície de energia potencial eletrônica da molécula H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> é apropriadamente descrita por um particular esquema de vetores de Jacobi, chamado vetores diátomo-diátomo. Usando este esquema de coordenadas ortogonais locais, o potencial é aproximadamente separável na proximidade das duas configurações (quirais) de mínimo. Esta aproximação permite estudar a torção, modo de menor energia, separada dos outros graus de liberdade. Como o potencial torcional da água oxigenada apresenta duas simetrias, uma em torno da configuração cis e a outra em torno da trans, pode-se fatorar o problema torcional introduzindo as 4 simetrias de Mathieu. Os níveis torcionais são calculados congelando os outros graus de liberdade, fixando as respectivas coordenadas nos seus valores de equilíbrio.

### METODOLOGIA:

O problema é resolvido através do método padrão, construindo as matrizes cinética e potencial a partir das integrais com as funções de base. Este procedimento é repetido para diversos valores da distância, R, entre os centros de massa dos dois diátomos OH. Esta coordenada é extremamente relacionada com o modo de stretching O-O, que é o modo de menor energia, depois do modo torcional.

### RESULTADOS:

Usando a metodologia descrita, constrói-se as curvas adiabáticas em função de  $R$ . Estas curvas permitem calcular as energias de ponto zero (ZPE) do stretching O-O e por isso melhorar a descrição da torção. Por outro lado, os níveis de stretching são importantes no estudo da reação de dissociação H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> → 2OH.

### CONCLUSÃO:

Os dados obtidos neste trabalho possibilitam a descrição da reação de dissociação em diátomos sem levar em consideração os outros modos internos mais energéticos. Isto permite uma grande redução de tempo computacional de cálculo. As curvas adiabáticas obtidas nesta aproximação representam o potencial de dissociação e podem ser usadas num cálculo bidimensional dos níveis de energia e da taxa de reação de dissociação.

Instituição de Fomento: UFRB

Palavras-chave: Curvas adiabáticas, stretching O-O, vetores de Jacobi.