XIX SBQT
Simpósio Brasileiro de Química Teórica 2017
12 a 17/Nov, 2017, Águas de Lindóia/SP, Brasil

Estudo Teórico do Mecanismo e da Cinética da Reação Atmosférica $HF + OH \rightarrow H_2O + F$

Gustavo Gomes de Sousa*, Flávio O. Sanches-Neto, Hugo Gontijo, Valter Henrique Carvalho-Silva

Grupo de Química Teórica e Estrutural de Anápolis, Ciências Exatas e Tecnológicas. Universidade Estadual de Goiás, CP 459, 75001-970 Anápolis, GO Brazil.

Abstract: Este resumo analisa as informações obtidas nas simulações computacionais da reação química HF + OH → F + H_2O [1]. Esta reação pertence a uma classe de reações atmosféricas que liberam espécies livres de halogênios as quais apresentam um papel fundamental na química atmosférica, pois são capazes de alterar o equilíbrio natural de formação e destruição de ozônio. Com o conhecimento atual da literatura não há disponibilidade de dados experimentais ou teóricos da constante cinética para esta reação. Dentro deste contexto, este trabalho tem como objetivo a determinação dos dados das constantes cinéticas em função da temperatura da reação HF + OH → F + H_2O. Para isso foi realizado cálculos teóricos de estrutura eletrônica utilizando vários níveis de cálculos (DFT e pós-HF) caracterizando os paramentos geométricos e as energias dos reagentes, produtos e da estrutura de transição. A partir dos dados geométricos e energéticos dos estados estacionários foi possível estimar constante cinética via Teoria do Estado de Transição com correção Deformada (*d*-TST) [2] e de Bell. Deste modo observa-se que a reação HF + OH → F + H_2O é endotérmica e apresenta uma alta barreira energética. Esse trabalho possibilitou a obtenção dos dados cinéticos da reação HF + OH → F + H_2O podendo concluir assim os dados teóricos apresentados para as series de reações de haletos de hidrogênio com o radical hidroxil [3] observando assim o comportamento dessa importantes reações atmosféricas.

Key-words: sub-Arrhenius, tunelamento, correção de Bell, *d*-TST

Support: Gustavo Gomes de Sousa agradece a PrP/UEG. Valter Henrique Carvalho Silva agradece à PrP / UEG e à FAPEG. Nayara Dantas Coutinho agradece FAPDF e CAPES. Vincenzo Aquilanti agradece ao Ministério italiano da Educação, Universidade e Pesquisa, MIUR, pelo apoio financeiro.

References:

[1] Song, H. & Guo, H. Mode specificity in bond selective reactions F + HOD ??? HF + OD and DF + OH. *J. Chem. Phys.* **142,** 1–8 (2015).

[2] Carvalho-Silva, V. H., Aquilanti, V., Oliveira, H. C. B. de & Mundim, K. C. Deformed Transition-State Theory: Deviation from Arrhenius Behavior and

Application to Bimolecular Hydrogen Transfer Reaction Rates in the Tunneling Regime. *J. Comput. Chem.* **38,** 178–188 (2017).

[3] Aquilanti, V., Coutinho, N. D. & Carvalho-Silva, V. H. Kinetics of Low-Temperature Transitions and Reaction Rate Theory from Non-Equilibrium Distributions. *Philos. Trans. R. Soc. London A* **375,** 20160204 (2017).