

**Estudo teórico do acoplamento vibrônico no ácido fórmico e
consequências para a fotodissociação**

TEO Palestra

Itamar Borges Jr.

Instituto Militar de Engenharia

Alexandre B. Rocha

Dep. de Físico Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro

O ácido fórmico (HCOOH) tem um importante papel na química interestelar e está entre os poluidores mais abundantes na atmosfera. O espectro de absorção na região de 260 - 225 nm apresenta uma estrutura vibracional bem definida superimposta a um background difuso. Isto corresponde à transição entre os estados fundamental (S_0) e excitado (S_1) e consequente dissociação da molécula. Experimentalmente, se verifica que o canal $H_2O + CO$ é muito mais provável que o canal $CO_2 + H_2$, ainda que as barreiras de reação de ambos tenham alturas semelhantes. O motivo desta diferença é o relaxamento para o estado fundamental via acoplamento vibrônico. Estudamos este acoplamento vibrônico na forma trans do HCOOH. Momentos de dipolo de transição entre os estados S_0 e S_1 foram calculados ao longo das coordenadas normais usando funções de onda eletrônicas complete active space self consistent field (CASSCF). A partir dos momentos calculamos as forças de oscilador óticas para a transição entre os dois estados. Usamos estes resultados para discutir os modos normais dominantes na dissociação molecular através de acoplamento vibrônico e explicar a diferença entre os canais possíveis.