



## ¿CUÁNTAS MOLÉCULAS DE AGUA SE NECESITAN PARA DISOCIAR LOS ÁCIDOS HX? (X = F, Cl, Br, I)

Alba Vargas-Caamal,<sup>1</sup> José Luis Cabellos,<sup>1</sup> Filiberto Ortiz-Chi,<sup>2</sup> Sukanta Mondal,<sup>1</sup> Albeiro Restrepo<sup>3</sup> y Gabriel Merino<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física Aplicada. Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Unidad Mérida. Km. 6 Antigua carretera a Progreso, C.P. 97310, Mérida, Yucatán, México.

<sup>2</sup>Cátedra CONACYT, División Académica de Ciencias Básicas, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, C.P. 86690, Cunduacán, Tabasco, México.

<sup>3</sup>Instituto de Química, Universidad de Antioquia UdeA. Medellín, Colombia.

e-mail: alba.vargas@cinvestav.mx

En este trabajo se exploró la superficie de energía potencial de los ácidos HX (X= F, Cl, Br, I) con moléculas de agua (de una a siete), para saber cuántas de éstas son necesarias para disociarlos y conocer la estructura de mínima energía. Para ello se empleó el algoritmo *Bilatu*<sup>1</sup> y la teoría del funcional de la densidad (DFT por sus siglas en inglés). Los cálculos incluyen la corrección por dispersión D3 de Grimme<sup>2</sup> con el funcional B2PLYP-D3 y se utilizó el conjunto de base def2-TZVP. Los resultados muestran que es posible disociar parcialmente el HF con siete moléculas de agua. Con base en los resultados obtenidos con corrección de punto cero (ZPE), el HCl se disocia con cuatro moléculas de agua y coincide con otros reportes.<sup>3,4</sup> Sin embargo, cuando se consideran los factores entrópicos se requieren cinco moléculas para que ocurra la disociación.<sup>5,6</sup> En los casos de los ácidos HBr y HI, la disociación se lleva a cabo con cuatro y tres moléculas de agua, respectivamente. Esta disminución en el número de moléculas de agua se relaciona con el orden de los valores de  $pK_a$  para estos ácidos (HF > HCl > HBr > HI). Las interacciones que estabilizan los cúmulos son: puentes de hidrógeno entre moléculas de agua y HX-agua, interacciones  $X\cdots H$  de largo alcance, así como la microsolvatación de iones hidronio  $H_3O^+$  (Eigen cationes). El aumento sucesivo de moléculas de agua disminuye las distancias  $O\cdots H$  y simultáneamente incrementa las distancias  $H-X$ . En el estudio también se calcularon los índices de Wiberg y los resultados proporcionan la correlación y clasificación de los cúmulos de acuerdo al tipo de disociación (total, parcial o nula) del enlace H-X.

1. Cabellos, J.L.; Ortiz-Chi, F.; Ramírez, A.; Merino, G. *Bilatu* 1.0. Cinvestav, Mérida, **2013**.
2. Grimme, S.; Steinmetz, M. *Phys Chem Chem Phys*. **2013**, 15(38), 16031–16042.
3. Amirand, C.; Maillard, D. *J. Mol. Struct.* **1988**, 176, 181.
4. Farnik, M.; Weimann, M.; Suhm, M.A. *J. Chem. Phys.* **2003**, 118, 10120.
5. Guggemos, N.; Slavicek, P.; Kresin, V.V. *Phys. Rev. Lett.* **2015**, 114, 043401.
6. Vargas-Caamal, A.; Cabellos, J.L.; Ortiz-Chi, F.; Rzepa, H.S.; Restrepo, A.; Merino, G. *Chem. Eur. J.* **2016**, 22, 2812-2818.