



XXVIII Comunicaciones Científicas y Tecnológicas

Orden Poster: CE-006 (ID: 2496)

Autor: Miranda, Matias Orlando

Título: Estudio Teórico del Potencial PAEM en Enlaces de Halógeno presentes en Intermediarios de Interés Atmosférico

Director: Duarte, Darío Jorge Roberto

Palabras clave: Enlace de halógeno, densidad electrónica, PAEM

Área de Beca: Cs. Naturales Y Exactas

Tipo Beca: Conicet

Periodo: 01/04/2019 al 31/03/2025

Lugar de trabajo: Facultad De Cs. Exactas Y Naturales Y Agrimensura

Proyecto: (18F009) Influencia de interacciones moleculares en reacciones químicas de interés atmosférico.

Resumen:

El PAEM (por sus siglas en inglés Potential Acting on One Electron within a Molecule) es una técnica teórica utilizada en química cuántica para entender y analizar las interacciones químicas entre átomos y moléculas, indicando la energía potencial que actúa en un electrón debido a la presencia de otros átomos y electrones en la misma molécula. El potencial PAEM (ϵ_{PAEM}) incluye al potencial electrostático (ϵ_{ES}) y al potencial de intercambio (ϵ_{EX}) bajo la relación:

$$\epsilon_{PAEM} = -\epsilon_{ES} + \epsilon_{EX}$$

La técnica PAEM permite analizar la forma en que los electrones son compartidos entre los átomos en una molécula, lo que puede proporcionar información sobre la covalencia de las interacciones. La naturaleza de los enlaces de halógeno (EXs) ha sido objeto de debate en la literatura científica, ya que algunos autores sugieren que estas interacciones son fundamentalmente de origen cuántico. Otros estudios, sin embargo, sugieren que los EXs son interacciones que se explican mejor a través de su naturaleza electrostática. Con el objeto de brindar nueva información acerca de la naturaleza covalente de los EXs, hemos realizado un estudio del ϵ_{PAEM} sobre los complejos $YX \cdots CHO$ (con $Y = Cl, Br, HO$ y $X = Cl, Br$). Estos complejos fueron seleccionados por su potencial implicancia en reacciones químicas de interés atmosférico como intermediarios de reacción.

El efecto del sustituyente Y en los complejos $YX \cdots CHO$ (con $Y = Cl, Br, HO$ y $X = Cl, Br$) indica que, en líneas generales, un mayor ϵ_{PAEM} sobre el EX (indicador de su covalencia) acompaña a una mayor fortaleza de interacción. Sin embargo, para los complejos menos estables, se observa que el ϵ_{PAEM} no muestra cambios significativos para EXs de distinta fortaleza. Esto podría indicar que en los EXs más fuertes el carácter covalente influye más que en los EXs más débiles, siendo la fortaleza de estos últimos determinada por la contribución electrostática.