

Área de Beca: CE - Cs. Exactas y Naturales

Título del Trabajo: INTERACCIONES  $\pi$ -HOLE: EL CASO DE LOS TRIHALUROS DE BORO. UN ESTUDIO BASADO EN LOS MAPAS DE POTENCIAL ELECTROSTÁTICO MOLECULAR Y EL LAPLACIANO DE LA DENSIDAD ELECTRÓNICA.

Autores: BURALLI, GABRIEL J.; DUARTE, DARÍO J. R.; PERUCHENA, NÉLIDA M.

E-mail de Contacto: gajebu@hotmail.com

Teléfono: 0379-4457996 int. 101

Tipo de Beca: Cofinanciadas Tipo I

Resolución N°: 484/13D

Período: 01/04/2013 - 31/03/2016

Proyecto Acreditado: 2010-F23. Interacciones moleculares inusuales. Densidad electrónica y Laplaciano en sistemas químicos de interés biológico y tecnológico. Secretaría General de Ciencia y Técnica. Período: 2011-2014.

Lugar de Trabajo: Facultad de Cs. Exactas y Naturales y Agrimensura

Palabras Claves: QTAIM, CCCV, enlace de boro

**Resumen:**

Las interacciones moleculares juegan un importante rol en muchas áreas de la química, además desempeñan un papel fundamental en la estabilización de macromoléculas biológicas como las proteínas. El estudio teórico de dichas interacciones se ha convertido en un área de gran interés, dado que permite explorar y conocer las características de las mismas, posibilitando de esta manera el desarrollo y la funcionalización de nuevas estructuras moleculares y nanomateriales, con propiedades fisicoquímicas particulares.

En este trabajo se ha realizado un estudio teórico de las interacciones mediadas por boro, es decir aquellas en la que el átomo de boro interacciona con una base de Lewis. El boro presenta una atracción particular por regiones moleculares con concentración de carga electrónica, dado que es deficiente en electrones por poseer un orbital vacante  $2p_0$  en dirección perpendicular al plano molecular. Politzer y col. han denominado a esta región de la molécula con baja densidad electrónica como  $\pi$ -hole y lo definen como una región de baja densidad electrónica que es perpendicular al plano molecular. El origen de estas interacciones resulta de la atracción entre el  $\pi$ -hole del ácido de Lewis y la acumulación de densidad electrónica en la base de Lewis.

En el presente trabajo se han estudiado los sistemas formados entre los ácidos de Lewis  $BX_3$  (con  $X=H, F, Cl, Br$ ) frente a distintas bases de Lewis como  $NH_3$ ,  $S(CH_3)_2$ , y  $O(CH_3)_2$ , los cálculos se realizaron a nivel MP2/aug-cc-pVTZ//B3LYP/6-311G(d,p). Los cálculos topológicos de la distribución de la densidad se realizaron con los programas AIM 2000 y AIMAll. Los mapas de potencial electrostático molecular fueron calculados al mismo nivel y montados sobre isosuperficies moleculares de densidad electrónica constante de 0,001 u.a.

Los resultados son consistentes con los obtenidos por otros investigadores, y permiten evidenciar que la fortaleza como ácidos de Lewis de los derivados del borano aumentan en el sentido  $BF_3 < BCl_3 < BBr_3$ . Los rangos de energía de interacción para los complejos oscilan entre -4 a -30 kcal/mol. El análisis revela un cambio en la hibridación del átomo de boro en el complejo respecto de los monómeros aislados, de una estructura trigonal planar (hibridación  $sp^2$ ) en el monómero, a una estructura tetraédrica (hibridación  $sp^3$ ) en el complejo.

El análisis topológico de la densidad de carga electrónica y su Laplaciano muestran claramente que la interacción de los complejos enlazados por boro se produce entre la región de depresión de densidad electrónica que presenta el átomo de boro y la región de acumulación de carga electrónica de la base de Lewis. El análisis topológico del Laplaciano de la densidad electrónica muestra la redistribución electrónica del par libre de la base de Lewis luego de la formación del complejo.

Por otra parte, el estudio de los puntos críticos del Laplaciano de la densidad electrónica de la concentración de carga de la capa de valencia de los trihaluros de boro resultó de gran utilidad para evaluar el comportamiento atípico que presenta el  $BF_3$  como ácido de Lewis, con respecto a  $BCl_3$  y  $BBr_3$ . La información cuantitativa obtenida de los puntos críticos (3,-3), (3,-1) y (3,+1) permite comprender de una manera más profunda las redistribuciones electrónicas que se producen en la molécula luego de la formación del complejo.

Becario  
(Firma)Co-Autor  
(Firma)Co-Autor  
(Firma)Director de Beca  
(Firma y Aclaración)Director de Proyecto  
(Firma y Aclaración)

Control: 23qfiqftk