



XXIII Comunicaciones Científicas y Tecnológicas

Orden Poster: CE-076 (ID: 1023)

Autor: Buralli, Gabriel Jesus

Título: Inusuales Interacciones “Doble hole-Lump” en complejos enlazados por calcógeno

Director:

Palabras clave: calcógeno, interacciones hole-lump, QTAIM, Laplaciano

Área de Beca: Cs. Naturales Y Exactas

Tipo Beca: Cofinanciadas Doctorales

Periodo: 01/04/2013 al 31/03/2018

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

Proyecto: (14F017) Interacciones moleculares en entornos químicos y bioquímicos. Interacciones hole-lumps Efectos sobre la Estructura y Reactividad.

Resumen:

Un enlace de calcógeno convencional puede definirse como una interacción del tipo Z-X---B (X= S, Se, Te, Po y B=base de Lewis). Los átomos de calcógeno presentan una región de potencial electrostático positivo en la dirección del enlace covalente Z-X denominado “agujero sigma”, que le permite interaccionar con bases de Lewis. En trabajos recientes se ha reportado la capacidad de los átomos de calcógeno de actuar simultáneamente como ácidos y bases de Lewis, formando complejos cuya fortaleza es comparable a la de los bien conocidos enlaces de halógeno e hidrógeno.

En este trabajo se han estudiado las interacciones S---S, Se---Se y Te---Te, en los complejos ZHX---XHZ (con X = S, Se, Te; y Z = -CN, -NC, -Cl, -F), con el objeto de conocer la naturaleza de estas inusuales interacciones y obtener un conocimiento profundo acerca de los fundamentos fisicoquímicos que rigen su formación y estabilidad. La optimización geométrica de monómeros y dímeros se realizó sin restricciones con el paquete de programas Gaussian03 al nivel MP2/aug-cc-pVTZ. El análisis de la densidad electrónica y de su función Laplaciana se realizó en el marco de la teoría QTAIM (Quantum Theory of Atoms in Molecules, por sus siglas en inglés) con el programa AIMAll y la descomposición de la Energía de interacción fue realizada con el método LMOEDA (Localized Molecular Orbital Energy Decomposition Analysis, por sus siglas en inglés) con el paquete de programa GAMESS.

La descomposición energética indica que las componentes electrostática (Eele) y de polarización (Epol) son las que más contribuyen a la estabilización de estos sistemas, estas magnitudes se incrementan a medida que aumenta la fortaleza de los complejos. El análisis de la densidad electrónica, revela la existencia de un punto crítico de enlace (PCE) y un camino de enlace que une los átomos de calcógeno interactuantes, indicando la existencia de una interacción molecular del tipo S---S, Se---Se y Te---Te.

El análisis de la función L(r) muestra que la formación de los complejos estudiados se debe una interacción “doble hole-lump” y tiene su origen en la atracción electrostática entre la región de acumulación de carga (lump) en la concentración de carga de la capa de valencia (CCCV) correspondiente a los pares libres de un átomo de calcógeno (S, Se y Te) y el núcleo desprotegido del otro átomo de calcógeno (hole) y viceversa. Por otra parte, la correlación encontrada entre Ve-n(rb) y la Energía de Binding, indica que la atracción electrostática juega un importante rol en la determinación estructural y la estabilidad de estos complejos.