



XXVI Comunicaciones Científicas y Tecnológicas

Orden Poster: CE-013 (ID: 1955)

Autor: Miranda, Matias Orlando

Título: Enlaces de Halógeno Estabilizados por un Canal de Intercambio Electrónico

Director: Duarte, Darío Jorge Roberto

Palabras clave: interacciones moleculares, enlaces de halógeno, agujero sigma, descomposición energética, potencial electrostático

Área de Beca: Cs. Naturales Y Exactas

Tipo Beca: Conicet

Periodo: 01/04/2019 al 01/04/2024

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 agujero sigma es un concepto importante que se ha utilizado mucho últimamente para describir al enlace de halógeno (EX) esencialmente como interacción de naturaleza electrostática. Sin embargo, esta idea no está exenta de controversia. En este trabajo se ha aplicado el análisis de descomposición de la energía orbital molecular localizada (LMOEDA) y el análisis del potencial electrostático a los complejos $\text{OCl}\cdots\text{B}$ ($\text{B} = \text{CO}, \text{PH}_3, \text{SH}_2, \text{CS}, \text{NH}_3, \text{OH}^-$). Los resultados muestran que en la geometría de equilibrio el efecto estabilizador que surge del principio de exclusión de Pauli es de mayor magnitud que las interacciones electrostáticas. Además, parece que se establece un canal de intercambio electrónico a cierta distancia de aproximación entre los monómeros.