
Area: CE - Cs. Exactas y Naturales

Título del Trabajo: **TRANSMISIÓN DE INTERACCIONES MAGNÉTICAS A TRAVÉS DE ENLACES DE HIDRÓGENO**

Autores: MONTERO, MARCOS D.-AUCAR, GUSTAVO A.

E-mail de Contacto: montero.marcos87@gmail.com

Teléfono: 3624067000

Tipo de Beca: UNNE Pregrado

Resolución Nº: 141/12 CS

Período: 01/03/2012 - 01/03/2013

Proyecto Acreditado: 11220090100654, **Efectos electrónicos sobre propiedades eléctricas y magnéticas de sistemas moleculares y de puntos cuánticos**, CONICET, 02/2010-02/2013.

Lugar de Trabajo: Facultad de Cs. Exactas y Naturales y Agrimensura e Instituto IMIT

Palabras Claves: Enlaces de hidrógeno, parámetros de RMN, Transferencia protónica

Resumen:

El estudio de los mecanismos electrónicos que potencian o facilitan la transmisión de las interacciones magnéticas a través de enlaces de hidrógeno, EH, resulta relevante debido a que permite entender la física involucrada en este tipo de enlaces tan importante para la vida. Los parámetros espectroscópicos de la Resonancia Magnética Nuclear, RMN, son sondas muy sensibles a escala atómica.

El estudio teórico posee ciertas ventajas relativas respecto de los estudios experimentales en cuanto a que permiten establecer correlaciones entre valores de contribuciones parciales a los parámetros, definidas teóricamente, y los mecanismos electrónicos involucrados.

Se estudiaron en particular los mecanismos de transferencia del protón del EH en bases de Schiff, que son compuestos moleculares muy utilizados en la industria del plástico y en la tecnología de cristales líquidos; y el posible fenómeno de enlace de hidrógeno asistido por resonancia. Para ello se analizaron sistemas moleculares pequeños (no más de 20 átomos) en los que el EH contribuye de manera significativa en las propiedades moleculares. En todos los casos se estudiaron los apantallamientos magnéticos y los acoplamientos indirectos entre espines nucleares buscando correlacionar los valores obtenidos teóricamente entre sí y con los medidos experimentalmente.

Entre los objetivos se buscó entender la física involucrada en la transmisión de las interacciones magnéticas a través de los EH, ampliando estudios propios previos sobre transferencia de protones en bases de Schiff a otros compuestos que contengan enlaces de hidrógeno, tales como el Malonaldehído y este sustituido. Por otro lado, se buscó correlacionar algunos parámetros de RMN entre sí, con el objeto de establecer algún criterio que permita predecir la posición del protón en el EH.

La metodología utilizada fue la teoría de Funcionales de Densidad (DFT) a nivel B3LYP, tanto para la optimización de geometrías como para el cálculo de parámetros RMN, mediante el uso del paquete de programas Gaussian 2003.

Se encontró que la correlación entre acoplamientos de espines nucleares y los apantallamientos magnéticos con la distancia protón-nitrógeno en los compuestos analizados arroja una dependencia funcional del tipo polinómica; cúbica y cuadrática respectivamente. Para el primer caso por ejemplo, debido al punto de inflexión, se puede predecir a qué tautómero pertenece el protón en el EH. Cabe destacar que dentro de los compuestos estudiados existen tautómeros más estables que otros. Esto se puede inferir de las curvas de energía potencial (PES).