



XXII Comunicaciones Cientificas y Tecnologicas

Orden Poster: CE-079 (ID: 549)

Autor: Buralli, Gabriel Jesus

Título: Interacciones hole-lump en complejos enlazados por calcógeno S y Se con etileno y acetileno como dadores de electrones.

Director:

Palabras clave: calcógeno, AIM, interacciones no covalentes

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 quimicos y bioquimicos. Interacciones hole-lumps Efectos sobre la Estructura y Reactividad.

Resumen:

En el presente trabajo se ha realizado un estudio teórico de complejos enlazados por calcógeno. Al igual que los enlaces de hidrógeno (HB) y halógeno (XB) los enlaces de calcógeno (YB) recién han comenzado a estudiarse, por lo que todavía existen muchas preguntas que aún no han sido respondidas acerca de las características estructurales, energéticas y electrónicas de estos sistemas. Por otra parte, las interacciones puenteadas por calcógeno tienen potenciales aplicaciones en el campo de la ingeniería cristalina, la nanotecnología, y en el diseño de materiales.

Un enlace de calcógeno puede definirse como una interacción del tipo Z-Y---B donde Y es un átomo de calcógeno S, Se y Te, Z es un átomo/grupo químico al que el átomo de calcógeno se halla covalentemente unido y B es una base de Lewis (especie química con pares electrónicos libres, o electrones pi). Al igual que los átomos de halógeno, los átomos de calcógeno presentan una región de potencial electrostático positivo en la dirección del enlace covalente denominado "agujero sigma", que le permite interaccionar con moléculas donadoras de electrones. La magnitud del agujero sigma aumenta con la polarizabilidad del átomo de calcógeno $S < Se < Te$ y con la capacidad atractora de electrones del grupo Z.

En este trabajo se ha investigado la naturaleza de las interacciones moleculares establecidas entre $O=C=Y\cdots\pi$ con $Y = -S, -Se$ (como ácidos de Lewis) y $\pi = C_2H_2$ y C_2H_4 como bases de Lewis. El objetivo es estudiar las características estructurales, energéticas y electrónicas de estas interacciones, que aún no han sido examinadas en profundidad.

La optimización geométrica de monómeros y dímeros se realizó sin restricciones con el paquete de programas Gaussian03 al nivel MP2/aug-cc-pVDZ y MP2/aug-cc-pVTZ. El análisis QTAIM [1,2] y la descomposición de la Energía de interacción LMOEDA se llevaron a cabo al mismo nivel de cálculo.

El análisis Energético y QTAIM revela que las interacciones $S\cdots\pi$ y $Se\cdots\pi$ son débiles, no obstante son comparables en fortaleza a las reportadas Zhao et al. [3] con carbeno metileno como base de Lewis. El análisis de la función $L(r)$ permite clasificar a estas interacciones como "hole-lump" y evidencia que la misma se produce entre la región de depresión de carga electrónica que presenta el átomo de calcógeno y la acumulación de carga electrónica de la base de Lewis. El análisis LMOEDA indica que las componetes energéticas de intercambio (Eex), electrostática (Eele) y de dispersión (Edisp) son las que más contribuyen a la estabilidad de estos complejos.

[1] Bader, R. F. W. Atoms in Molecules. A Quantum Theory, Clarendon Press, Oxford, 1990. [2] Popelier, P. L. A. Atoms in Molecules. An Introduction, Pearson Education: Harlow, UK, 2000.

[3] Zhao, Q.; Dacheng, F.; Youmin, S.; Jingcheng H.; Zhengting, C. Int. J. Quantum Chemistry (2011). 111: 3881-3887.