

Calculo da energia eletrônica SAPT e a força de ligação em complexos de di-hidrogênio $\text{NaH}\cdots\text{HCF}_3$ e $\text{NaH}\cdots\text{HCCl}_3$

Yan U.A. Viana (IC)¹, Boaz G. Oliveira (PQ)^{1*}

Universidade Federal do Oeste da Bahia, ¹Centro das Ciências Exatas e das Tecnologias, CEP 47810-059, Barreiras, Bahia, Brasil.

* E-mail: boaz.galdino@ufob.edu.br

Palavras chave: Ligação de di-hidrogênio, infravermelho, red-shift.

Abstract

Through the B3LYP/6-311++G(3df,3dp) calculations, this theoretical work was conceived to unveil the structures and infrared spectrums of the binary $\text{NaH}\cdots\text{HCF}_3$ and $\text{NaH}\cdots\text{HCCl}_3$ complexes. The formation as well as the prediction of strength of the $\text{H}\cdots\text{H}$ hydrogen bonds were examined by the bond length variations followed by changes in the stretch frequencies of the proton donors, namely as red- and blue-shifts.

Introdução

Em mais de um século de pesquisas, a ligação de hidrogênio tornou-se a interação mais importante da química [1]. Mais recentemente, com o surgimento da ligação de di-hidrogênio [2], $\text{H}\cdots\text{H}$, tem se demonstrado a importância das propriedades espectroscópicas e de força de interação de sistemas intermoleculares estabilizados por esta interação. Diante deste cenário, este plano de trabalho foi desenvolvido com o objetivo de estudar através de cálculos quânticos computacionais os complexos $\text{NaH}\cdots\text{HCF}_3$ e $\text{NaH}\cdots\text{HCCl}_3$ em termos de efeitos vibracionais *red-shift* ou *blue-shift* no centro ácido (H-C) e a relação destes com a força de interação.

Material e Métodos

Os cálculos computacionais foram executados pelo software GAUSSIAN 03W e desenvolvidos ao nível de teoria B3LYP/6-311++G(3df,3dp).

Resultados e Discussão

As geometrias dos complexos são ilustradas na figura 1, enquanto que, os resultados de estrutura e espectro são organizados na tabela 1.

Tabela 1. Valores de incremento (Å) na distância de ligação, *shift* (cm^{-1}) nas frequências de estiramento e distância R (Å).

Moléculas	Incremento	Shift	Distância
	$\Delta r_{\text{H-X}}$	$\Delta \nu_{\text{H-X}}$	$R_{\text{H}\cdots\text{H}}$
H-CF ₃	0,0046	-82,7	—
H-CCl ₃	0,0166	-257,8	—
Na-H (I)	-0,0004	77,9	1,909
Na-H (II)	-0,0019	97,7	1,725

Embora $\text{NaH}\cdots\text{HCF}_3$ seja mais fortemente ligado, os efeitos shift e de incremento nas ligações química são mais amenos frente ao complexo $\text{NaH}\cdots\text{HCCl}_3$.

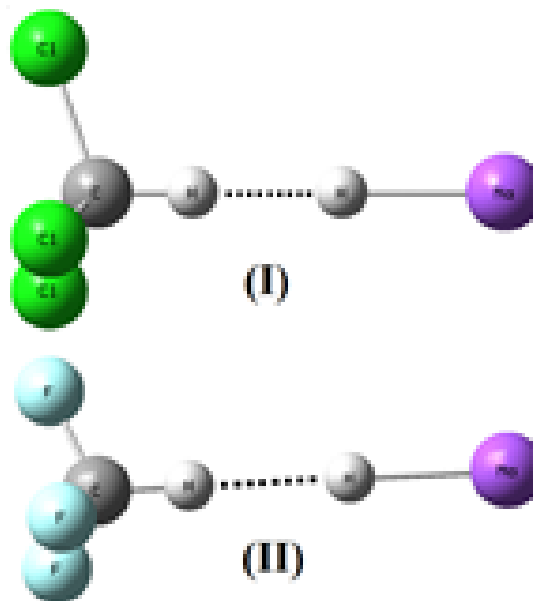


Figura 1. Geometrias otimizadas dos complexos $\text{Cl}_3\text{C-H}\cdots\text{H-Na}$ (I) e $\text{F}_3\text{C-H}\cdots\text{H-Na}$ (II).

Conclusões

Os resultados de estrutura e espectroscopia dos complexos de di-hidrogênio $\text{NaH}\cdots\text{HCF}_3$ e $\text{NaH}\cdots\text{HCCl}_3$ aponta para uma maior força de interação no complexo cujo doador de próton é o trifluorcarbono. Mesmo $\text{NaH}\cdots\text{HCF}_3$ apresentando uma distância de ligação de di-hidrogênio mais curta, variações estruturais e vibracionais mais acentuadas foram determinadas para $\text{NaH}\cdots\text{HCCl}_3$.

Agradecimentos

UFOB, CNPq, CAPES e FAPESB

Referências

- [1] P. Goymer, Nat. Chem. 4 (2012) 863.
- [2] B.G. Oliveira, Phys. Chem. Chem. Phys. 15 (2013) 37.