

Cálculo de partição de energia SAPT em complexos estabilizados por ligações de di-hidrogênio

Renato Q. Pordeus (IC)¹, Boaz G. Oliveira (PQ)^{2*}

Universidade Federal do Oeste da Bahia, ¹Centro das Ciências Biológicas e da Saúde e ²Centro das Ciências Exatas e das Tecnologias, CEP 47810-059, Barreiras, Bahia, Brasil.

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

Palavras chave: SAPT, ligação de di-hidrogênio, covalência.

Abstract

Among the intermolecular interactions known ever, the dihydrogen bonds ($H\cdots H$) have been widely studied regarding their structure and covalence. In line with this, the novel electronic partition methods can unveil the interaction strength for $H\cdots H$ through the computation of the partition of electronic energy.

Introdução

As interações intermoleculares têm sido foco de diversos estudos devido ao fato do compartilhamento de densidade eletrônica mediado pelo hidrogênio proporcionar uma força intermolecular compatível a ligações químicas covalentes [1]. Desvelar o caráter covalente de uma ligação química ou interação intermolecular tornou-se factível através da Partição da Energia Eletrônica (PEE) dos termos que compõem a estrutura química: eletrostático (Es), potencial de troca de spin (Ex), Indução (Ind), transferência de carga (TC) e dispersão de London (Disp) [2]. Desta forma, o presente plano de trabalho versa sobre o estudo de sistemas modelo formador por ligações de di-hidrogênio, $NaH\cdots HF$ e $NaH\cdots HCl$, para determinação de seus principais parâmetros estruturais e PEE.

Material e Métodos

As geometrias dos sistemas intermoleculares $NaH\cdots HF$ e $NaH\cdots HCl$ foram obtidas ao nível de teoria MP2/aug-cc-pVDZ com cálculos realizados pelo software GAUSSIAN 03. Os valores de PEE obtidos através da aplicação da metodologia SAPT (*Symmetry-Adapted Perturbation Theory*) através do programa PSi4.

Resultados e Discussão

Os resultados SAPT são apresentados na tabela 1.

Tabela 1. Valores PEE para os complexos $NaH\cdots HF$ e $NaH\cdots HCl$.

Parâmetros PEE	$NaH\cdots HCl$	$NaH\cdots HF$
Es	-34,96	-35,52
Ex	64,90	36,17
Ind	-87,96	-28,11
Disp	-11,84	-3,10
TC	-13,41	-4,64

* Valores em kcal mol⁻¹.

O complexo $NaH\cdots HCl$ apresentou uma ligação de di-hidrogênio $H\cdots H$ muito curta de 0,980 Å [3]. Conforme os resultados PEE listados na tabela 1, a elevada força de interação em $NaH\cdots HCl$ é claramente justificada pela alta contribuição indutiva de -87,96 kcal mol⁻¹.

Conclusões

As discrepâncias entre as distancias das ligações de di-hidrogênio $R_{H\cdots H}$, nos complexos $NaH\cdots HF$ e $NaH\cdots HCl$ decorrem da majoritária contribuição indutiva. Ambos complexos demonstram a existência de covalência intermolecular, proeminentemente em $NaH\cdots HCl$, mesmo com a acentuada repulsão do potencial de troca de spin.

Agradecimentos

Em especial ao meu orientador, ao PIBIC-UFOB/FAPESB e a PROPGL.

Referências

- [1] B.G. Oliveira, R.C.M.U. Araújo, Quim. Nova 35 (2012) 2002.
- [2] S.J. Grabowski, Chem. Rev. 111 (2011) 2597
- [3] B.G. Oliveira, Phys. Chem. Chem. Phys. 15 (2013) 37.