

## INTERACCIONES MOLECULARES “HOLE-LUMP” EN COMPLEJOS S $\cdots$ $\pi$ y Se $\cdots$ $\pi$ - Química Teórica y Computacional

Gabriel J. Buralli\*, Darío J. R. Duarte\* y Nélica M. Peruchena\*

\*Laboratorio de Estructura Molecular y Propiedades – Dpto. de Química – Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura – Universidad Nacional del Nordeste. Avenida Libertad 5460 – Corrientes (3400).

\*Instituto de Química Básica y Aplicada del Nordeste Argentino (IQUIBA-NEA), UNNE-CONICET, Avenida Libertad 5460, 3400 Corrientes, Argentina.

e-mail: [djr\\_duarte@hotmail.com](mailto:djr_duarte@hotmail.com)

Un enlace de calcógeno convencional puede definirse como una interacción del tipo Z–Y $\cdots$ B (Y=S,Se,Te y B=base de Lewis). Al igual que los átomos de halógeno, los calcógenos presentan una región de potencial electrostático positivo en la dirección del enlace covalente Z–Y denominado “agujero sigma”, que le permite interactuar con bases de Lewis. La magnitud del agujero sigma aumenta con la polarizabilidad del átomo de calcógeno en el sentido S<Se<Te y con la capacidad atractora de electrones del grupo Z.<sup>1,2,3</sup> En este trabajo se han estudiado las interacciones Y $\cdots$  $\pi$  (Y= S, Se) con el objeto de entender las características estructurales, energéticas y electrónicas de estos complejos, que aún no han sido examinados en profundidad. La optimización geométrica de monómeros y dímeros se realizó sin restricciones con el paquete de programas Gaussian03 al nivel MP2/aug-cc-pVTZ. El análisis de la densidad electrónica se realizó con el programa AIMAll y la descomposición energética con el paquete de programas GAMESS. Los complejos estudiados adoptan una conformación “T-shape” en las que el átomo de calcógeno S/Se interactúa en forma perpendicular con la nube electrónica de la base de Lewis (etileno y acetileno). La descomposición energética indica que las componentes de intercambio ( $E_{ex}$ ), electrostática ( $E_{ele}$ ) y de dispersión ( $E_{disp}$ ) son las que más contribuyen a la estabilización de estos sistemas. La estabilidad de estos complejos es comparable a la de los bien conocidos enlaces de halógeno. El análisis de la densidad electrónica, revela la existencia de un punto crítico de enlace (PCE) y un camino de enlace que une el átomo de calcógeno con la nube  $\pi$  de la base de Lewis, indicando la existencia de una interacción molecular del tipo S $\cdots$  $\pi$  y Se $\cdots$  $\pi$ . La función  $L(\mathbf{r})=-\nabla^2\rho(\mathbf{r})$  revela que estas interacciones se producen entre la región de depresión de carga electrónica (hole) que presenta el átomo de calcógeno y la acumulación de carga electrónica de la base de Lewis (lump). La interacción electrostática entre la nube  $\pi$  y el núcleo del átomo de calcógeno juega un rol fundamental en la determinación de la geometría molecular de las interacciones S $\cdots$  $\pi$  y Se $\cdots$  $\pi$ .

### Referencias

- (1) Wang, W., Ji, B. and Zhang, Y. (2009) J. Phys. Chem. A 113:8132–8135.
- (2) Zhao, Q., Dacheng, F., Youmin, S., Jingcheng H. and Zhengting, C. (2011) Int. J. Quantum Chemistry. 111: 3881-3887.
- (3) Murray, J., Lane, P., Clark, T., Riley, K., and Politzer, P. (2012) J. Mol. Model 18:541-548.