



ESTUDIO *AB INITIO* DE DIMEROS CON INTERACCIONES DE PUENTE DE HIDRÓGENO

Joanatan Bautista¹, Nelly Ma. González, Joel Ireta¹ y Cuevas Erick¹

¹Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM; México ² Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa; México
e-mail: jmbrq2014@gmail.com

El puente de hidrógeno (HB por sus siglas en inglés) es una de las interacciones más recurrentes en la naturaleza, tanto en macromoléculas orgánicas, como en compuestos inorgánicos. Sin embargo la naturaleza del mismo ha sido fuente de diversos temas de estudio que permiten incrementar el entendimiento de los fenómenos electrónicos que se llevan a cabo durante la formación de dichas interacciones.

Los HB's son interacciones de tipo ***XH - Y*** donde ***X*** es el donador de hidrógeno y ***Y*** el aceptor. Estas pueden ser divididas en convencionales, es decir, en las que ***X*** y ***Y*** cumplen con la característica de ser átomos electronegativos con pares electrónicos libres como O, N y F. El resto de interacciones son clasificadas como no convencionales, en los cuales el donador o aceptor es de diferente naturaleza química.

Nuestro grupo de investigación se ha enfocado en el estudio de este último tipo de interacción, para lo cual se analiza la naturaleza estructural, energética y topológica, entre dímeros con estructura tipo HXY y HYX siendo X nitrógeno y fósforo, mientras que Y=C-Pb. Dichos sistemas son similares a dímeros como el formado por cianuro de hidrógeno (HCN – HCN) y el isocianuro de hidrógeno (HNC – HNC), sistemas que presentan puentes no convencionales. Para ello se recurrió a metodologías *Ab initio* (MP2 y CCSD(T)), y los conjuntos de funciones de base aug-cc-pVnZ (donde n=D, T y Q). Finalmente, con el fin de complementar nuestro análisis, se caracterizó la densidad electrónica mediante diferentes descriptores moleculares.

Referencias

1. Devarajan, D. & Frenking, Chemistry – An Asian Journal (2012), 7:1296–1311
2. Hibbert, F. & Emsley, J (1990), 26:255-379
3. Oliveira, B. G. (2013), 15:1463