



Microsolvatación de NO^{-3} : Exploración estructural y análisis de enlace

Elizabeth Flórez,¹ Nancy Acelas,¹ César Ibargüen,^{1,2} Gabriel Merino,³ and Albeiro Restrepo³

¹Departamento de Ciencias Básicas, Universidad de Medellín, Antioquia, Colombia,
²Instituto de Química, Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia y ³Departamento de Física Aplicada, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados, Unidad Mérida, Mérida, Yuc., México
e-mail: elflorez@udem.edu.co

Una exhaustiva exploración de la superficie de energía potencial (SEP) asociada a la microsolvatación de nitrato aniónico usando la teoría de funcionales de la densidad (DFT) se encontró una diversidad estructural previamente inadvertida en la literatura científica para la $[\text{NO}_3 (\text{H}_2\text{O})_n]^-$; $n = 1-6$ clusters.

Se caracterizó dos tipos de interacciones que aportan a la estabilización de los cluster: 1. Enlaces de hidrógeno agua-agua tradicionales en cluster de agua; 2. Enlaces de hidrógeno del agua y la carga de Nitrato. La carga negativa formal, fortalece el enlace de hidrógeno entre las moléculas de agua.

Además es de destacarse la concordancia entre los datos experimentales disponibles (entalpías de hidratación, los espectros IR y las VDE energías (vertical detachment energies) y los valores obtenidos de nuestras estructuras.

Cada (SEP) es densamente poblado en las proximidades del correspondiente mínimo global con múltiples estructuras que contribuyen a las propiedades experimentales. Esto coloca una seria advertencia sobre la práctica generalizada e ingenuo de asignar las observaciones experimentales a estructuras individuales

Pathak, A.K. Theoretical study on microhydration of ion: Structure and polarizability. Chem. Phys. 2011. 384, 52–56.

Goebbert, D. J.; Garand, E.; Wende, T.; Bergmann, R.; Meijer, G.; Asmis, K. R.; Neumark, D. M.; Infrared Spectroscopy of the Microhydrated Nitrate Ions $\text{NO}_3^- (\text{H}_2\text{O})_n$. J. Phys. Chem. A. 2009, 113, 7584–7592.