



## Estudio teórico de las interacciones intermoleculares de aductos cristalinos perhaloareno-areno en términos de la densidad electrónica

Bruno Christian Landeros Rivera<sup>1</sup>, Rafael Moreno Esparza<sup>2</sup>, Jesús Hernández Trujillo<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Física y Química Teórica Facultad de Química UNAM, MÉXICO

<sup>2</sup> Departamento de Química Inorgánica y Nuclear, Facultad de Química UNAM, MÉXICO  
[brunolanderos@hotmail.com](mailto:brunolanderos@hotmail.com)

Los sintones basados en interacciones perhaloareno-areno se han convertido en un campo de estudio atractivo debido a las aplicaciones que han alcanzado en ciencias químicas, biológicas y de materiales<sup>1</sup>. Se estudiaron las interacciones intermoleculares y el efecto de sustitución de halógeno en el empaquetamiento cristalino de aductos perhaloareno-areno a través de métodos teóricos<sup>2</sup>. Se llevaron a cabo optimizaciones de geometría con la teoría de los funcionales de la densidad en estado sólido con el método LAPW para los complejos hexafluorobenceno-pireno, hexafluorobenceno-trifenileno, hexaclorobenceno-pireno y hexaclorobenceno-trifenileno partiendo de las geometrías cristalinas obtenidas de experimentos de difracción de rayos X realizados en nuestro laboratorio. Por medio de los descriptores de la teoría cuántica de átomos en moléculas se identificaron seis tipos de interacciones:  $\pi \cdots \pi$ ,  $\pi \cdots X$ ,  $\pi \cdots H$ ,  $X \cdots H$ ,  $H \cdots H$  and  $X \cdots X$  donde  $X = F$  o  $Cl$ . La densidad electrónica y algunas de sus propiedades en los puntos críticos de enlace y los índices NCI de permitieron categorizarlas como interacciones débiles de capa cerrada. Pese a que la sustitución de cloro por flúor conlleva un decremento en la fuerza de interacción  $\pi \cdots \pi$ , se observa un mayor efecto estabilizante en las  $\pi \cdots X$ , las  $X \cdots H$  y los enlaces de halógeno-halógeno. También se calcularon las energías de cohesión, siendo estas más negativas para los cristales moleculares que involucran al hexaclorobenceno. También se encontró que la dispersión es la contribución de largo alcance más relevante de las energías de dimerización de algunos pares de moléculas representativos fijados con la geometría cristalina.

1. Salonen, L. M.; Ellermann, M.; Diederich, F. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, 50, 4808–4842.
2. Landeros-Rivera, B.; Moreno-Esparza, R.; Hernández-Trujillo, J. *RCS Adv.* **2016**, 6, 77301-777309.