

Curso de Verano en Nanociencia y Nanotecnología

III Simposio Internacional Julio Palacios

A Coruña, 21 y 22 de Julio de 2022

RESUMEN

Atracción de aniones (cationes) mediante interacciones no-covalentes

Ibon Alkorta

Mediante cálculos químico-cuánticos hemos explorado mínimos estables que muestran enlaces de halógeno o hidrógeno entre moléculas cargadas con el mismo signo. A pesar de la repulsión iónica, los mínimos de energía locales se encuentran tanto en la fase gaseosa como en la solución acuosa. Las topologías del potencial electrostático y densidad de electrones, y la comparación con complejos neutros, revelan que la ionización no tiene un efecto significativo sobre las propiedades de los enlaces de halógeno e hidrógeno que mantienen unidos a los complejos. La estabilidad de los complejos en fase gaseosa se explica por fuerzas de atracción localizadas en un volumen situado en la región intermolecular y definida como región de atracción electrostática (RAE) y determinada por los análisis topológicos de la densidad electrónica y el potencial electrostático, así como las líneas de campo eléctrico. La naturaleza de la interacción en los mínimos y estados de transición (ET) indica la presencia de interacciones electrostáticas locales favorables en los mínimos que desaparecen en los ET.