

## Estudo da interação de hidrogênio.

João Batista Lopes Martins<sup>1</sup>, (PQ)\*, José R. dos Santos Politi<sup>1</sup> (PQ), Ricardo Gargano<sup>2</sup> (PQ), Edgardo Garcia<sup>1</sup> (PQ), Alessandra Ferreira Albernaz Vilela<sup>2</sup> (PQ)

Lopes@unb.br

<sup>1</sup>Universidade de Brasília, Instituto de Química, CP 4478, Brasília, DF, 70904-970

<sup>2</sup>Universidade de Brasília, Instituto de Física, CP 4455, Brasília, DF, 70904-970

Palavras Chave: *ab initio*, ligação de hidrogênio, funções de base.

### Introdução

A ligação de hidrogênio representa uma importante área de estudo em estrutura e funções em química, física e biologia. O modelo clássico da ligação de hidrogênio descreve uma interação direcional. Uma característica importante desta ligação num sistema A-H...B é que a ligação A-H enfraquece com o concomitante decréscimo da frequência de estiramento de AH.

Vários estudos teóricos já trataram os halometanos, devido a clara importância da interação de hidrogênio [1]. Existe suporte experimental, principalmente de infravermelho, que sugere que carbono de grupo CH pode formar ligação de hidrogênio. Os dímeros do fluormetano-água foram extensivamente estudados devido a chamada de ligação de hidrogênio imprópria em relação a convencional [2]. Neste estudo foram realizadas análises da influência da função de base com dois níveis distintos, o funcional de densidade (híbrido B3LYP) e o perturbacional MP2.

### Resultados e Discussão

Os resultados da otimização total do CH<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O mostram dois mínimos, tanto no MP2 quanto no B3LYP, para todas as funções de base utilizadas. O mínimo global é caracterizado por uma interação HC--HO, enquanto que o mínimo secundário é caracterizado por uma interação CH---OH. Nosso mínimo global está em concordância com o trabalho de Szczesniak et al. [3].

A distância interatômica HC---OH do mínimo global varia de 3.521 a 3.728Å para o B3LYP e de 3.306-3.642Å para o MP2. O resultado experimental do complexo CH<sub>4</sub>-água de Suenram et al. [4] indica uma separação do centro de massa de 3.70Å para o mínimo global. Os resultados mostram que incluir a função difusa em átomos leves (hidrogênio) indicam pouca influência na energia de interação (EI, Figura 1) e nas distâncias interatômicas quando se correlaciona com a inclusão de funções difusas em oxigênio. Portanto, a função de base 6-311+G(2d,2p) pode ser considerada uma "base mínima" para cálculos destes dímeros.

Tabela 1 – Funções de base usadas para os cálculos B3LYP e MP2

	6-31	6-311	6-311
a	+g(d)	+g(d)	++g(d)
b	+g(2d)	+g(2d)	++g(2d)
c	+g(2df)	+g(2df)	++g(2df)
d	+g(3d)	+g(3d)	++g(3d)
e	+g(3df)	+g(3df)	++g(3df)
A	+g(d,p)	+g(d,p)	++g(d,p)
B	+g(2d,2p)	+g(2d,2p)	++g(2d,2p)
C	+g(2df,2pd)	+g(2df,2pd)	++g(2df,2pd)
D	+g(3d,3p)	+g(3d,3p)	++g(3d,3p)
E	+g(3df,3dp)	+g(3df,3dp)	++g(3df,3dp)

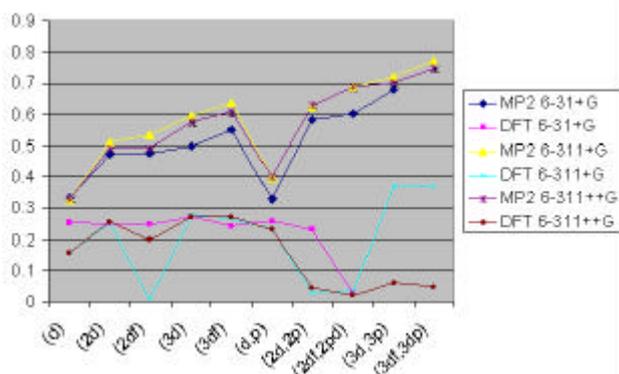


Figura 1. EI para as diversas bases e métodos estudados (as linhas foram traçadas para simplificar a visualização).

### Conclusões

Os resultados indicam que para o complexo estudado, a função de base 6-311+G(2d,2p) é suficiente para resultados de geometria e de EI.

### Agradecimentos

Finatec, CNPq, UnB.

<sup>1</sup> Martins J.B.L., Politi J.R.D., Braga A.D., Gargano R, Chem. Phys. Lett., 2006, 431, 51.

<sup>2</sup> Zierkiewicz, W., Michalska, D., Havlas, Z., Hobza, P., ChemPhysChem, 2002, 3, 511.

<sup>3</sup> Szczesniak, M. M., Chalasinski, G., Cybulski, S. M., Cieplak, P., J. Chem. Phys., 1993, 98, 3078.

<sup>4</sup> Suenram, R. D., Fraser, G. T., Lovas, F. J., Kawashima, Y., J.  
Chem. Phys., 1994, 101, 7230.