

UM ESTUDO TEÓRICO DE PROPRIEDADES MOLECULARES EM COMPLEXOS DE HIDROGÊNIO TRIMOLECULARES $C_2H_4 \cdots 2HF$, $C_2H_2 \cdots 2HF$ E $C_3H_6 \cdots 2HF$

Boaz G. Oliveira*, Regiane C. M. U. Araújo, Flávia S. Pereira, Emmanuela F. Lima, Washington L. V. Silva e Antônio B. Carvalho

Departamento de Química, Universidade Federal da Paraíba, 58036-300 João Pessoa – PB, Brasil

Mozart N. Ramos

Departamento de Química Fundamental, Universidade Federal de Pernambuco, 50739-901 Recife – PE, Brasil

Geometrias otimizadas dos complexos de hidrogênio trimoleculares π - $C_2H_4 \cdots 2HF$ (IV), u - π - $C_2H_2 \cdots 2HF$ (V) e p - π - $C_3H_6 \cdots 2HF$ (VI) usando o nível de cálculo B3LYP/6-311++G(d,p)

π - $C_2H_4 \cdots 2HF$			
H	-0.677211	-0.699338	1.211562
C	-1.458659	-0.175881	0.668578
H	-2.230281	0.316948	-1.250165
F	0.999821	1.380059	-0.000772
H	-2.231922	0.322042	1.247259
F	1.415191	-1.161948	0.000872
C	-1.457757	-0.178622	-0.668500
H	-0.675775	-0.704349	-1.208448
H	0.080263	1.153680	-0.001352
H	1.498319	-0.224958	-0.000228
u - π - $C_2H_2 \cdots 2HF$			
H	2.725403	1.380797	0.000000
C	2.117176	0.506911	0.000000
H	0.000000	1.010985	0.000000
F	-0.915600	1.235410	0.000000
H	-1.669650	-0.374449	0.000000
F	-1.685054	-1.309076	0.000000
C	1.464230	-0.502099	0.000000
H	0.861694	-1.383209	0.000000
p - π - $C_3H_6 \cdots 2HF$			
C	2.547301	-0.499352	-0.011005
C	1.348986	-0.034417	0.767316
C	1.381485	0.074976	-0.765117
H	3.449119	0.096587	0.050671
H	2.716145	-1.566271	-0.083506
H	1.450310	0.872773	1.351545
H	0.715447	-0.792046	1.213229
H	1.504353	1.055636	-1.209955
H	0.769400	-0.609593	-1.340408
H	-0.416141	0.822143	0.023889
F	-1.294867	1.162385	0.033320
H	-2.549230	-0.063750	-0.004950
F	-3.072471	-0.836021	-0.027506

*e-mail: boazgaldino@gmail.com