

HETEROPENTÁMEROS (ETANOL)₄-AGUA: ESTUDIO ESTRUCTURAL Y TERMODINÁMICO

Sol M. Mejía, Juan F. Orrego, Juan F. Espinal y Fanor Mondragón*
 Instituto de Química, Universidad de Antioquia, A.A. 1226, Medellín, Colombia

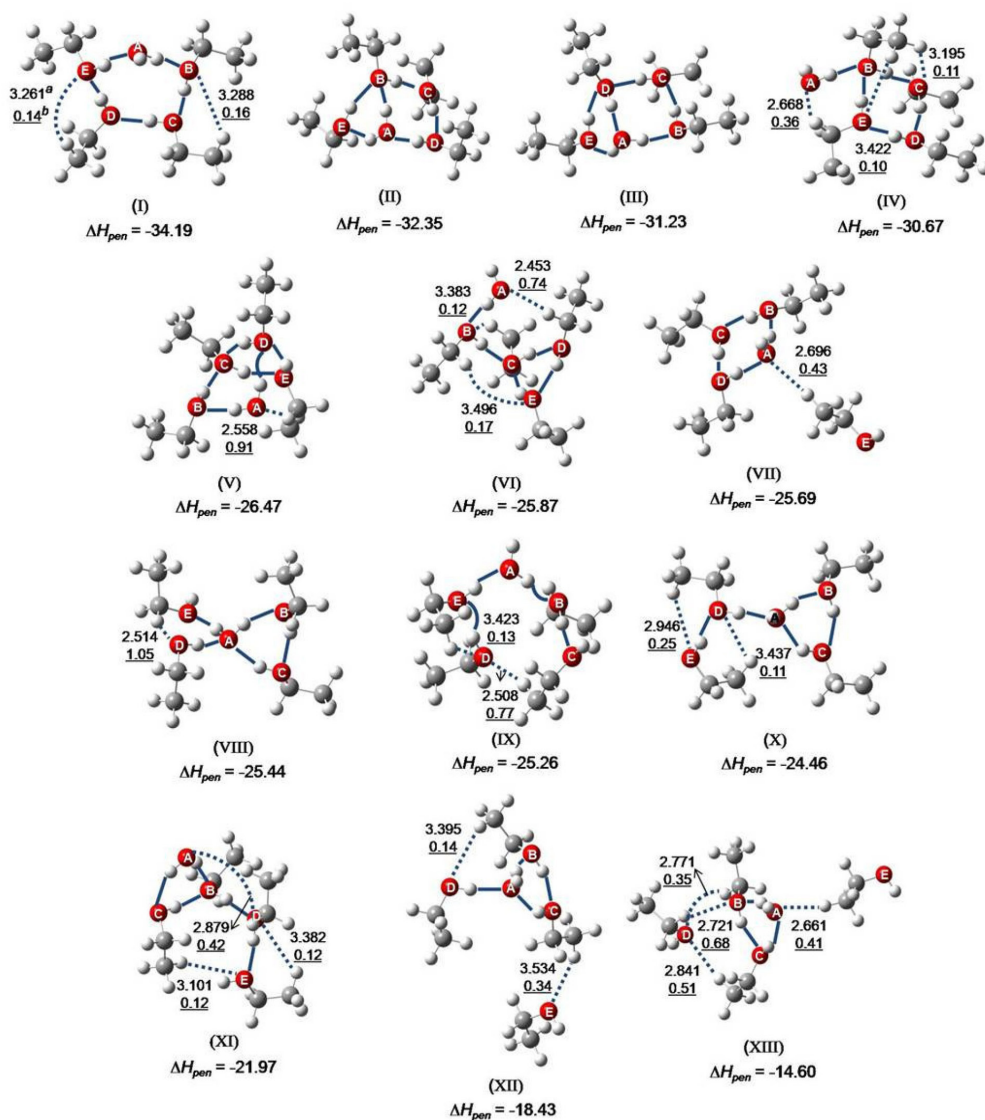


Figura 1S. Geometrías optimizadas de los 13 heteropentámeros (etanol)₄-agua estables correspondientes a patrones geométricos diferentes. Los puentes de hidrógeno primarios (O–H---O) son representados con líneas continuas azules y los puentes de hidrógeno secundarios (C–H---O) son representados con líneas punteadas azules. ^aDistancias de los puentes de hidrógeno secundarios en Å. ^bOrden de enlace de los puentes de hidrógeno secundarios x 10², (números subrayados). ΔH_{pen} : Entalpía de pentamerización en kcal/mol

*e-mail: fmondra@carios.udea.edu.co