

A REGRA DE BENT CONTEXTUALIZA A FORÇA DA LIGAÇÃO DE HIDROGÊNIO EM *CLUSTERS* TRIMOLECULARES

Ives T. O. Santos, Danilo G. Rego e Boaz G. Oliveira*

Instituto de Ciências Ambientais e Desenvolvimento Sustentável, Universidade Federal da Bahia, 47801-100 Barreiras – BA, Brasil

Relações entre parâmetros estruturais e vibracionais dos clusters trimoleculares $C_nH_m \cdots HCN \cdots HX$ (I, II, III e IV) obtidas à nível de teoria BHandHLYP/6-311++G(d,p)

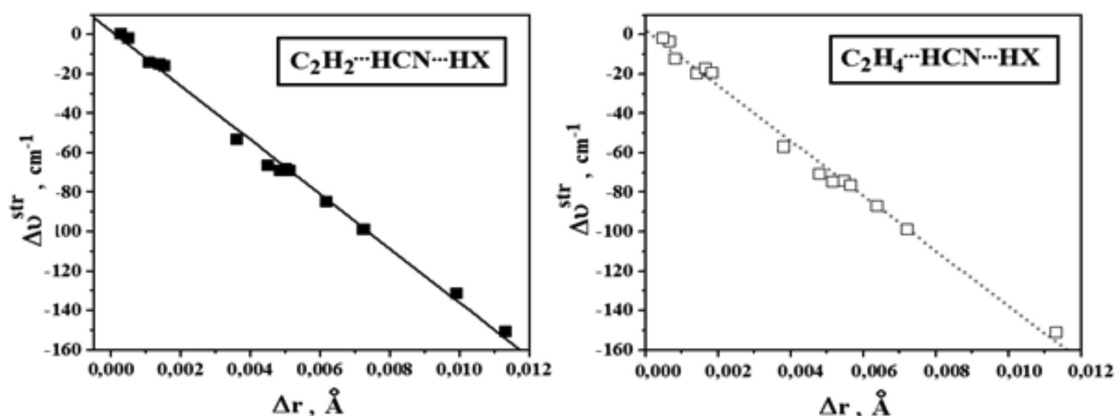


Figura 1S. Relação entre todos os modos red-shifts e as variações nos comprimentos de ligação

Coordenadas cartesianas das geometrias otimizadas dos complexos $C_nH_m \cdots HCN \cdots HX$ (I, II, III e IV) obtidas através da aplicação do nível de teoria BHandHLYP/6-311++G(d,p)

Tabela 1S. Coordenadas das geometrias otimizadas dos clusters trimoleculares $C_nH_m \cdots HCN \cdots HX$

I			II			III			IV		
C	4.39925	0.60450 -0.00158	C	-0.49580	-4.22767 0.00000	C	4.27708	-0.65477 0.00325	C	-4.06733	0.66698 0.00268
C	4.41566	-0.58494 -0.00169	C	0.69362	-4.21092 0.00000	C	4.25940	0.66615 0.00310	C	-4.07518	-0.65412 0.00279
H	4.40297	1.66215 -0.00145	C	0.03156	-0.57635 0.00000	H	4.25000	1.23244 0.92017	H	-4.08691	-1.21961 -0.91418
H	4.44800	-1.6421 -0.00192	H	-1.55292	-4.26143 0.00000	H	4.27330	1.23278 -0.91355	H	-4.09008	-1.21999 0.92010
H	1.82806	-0.02330 0.00523	H	1.75128	-4.21559 0.00000	H	4.28284	-1.22072 0.91990	H	-4.07229	1.23284 -0.91460
C	0.76321	-0.01938 0.00302	H	0.06094	-1.64093 0.00000	H	4.30587	-1.22021 -0.91320	H	-4.07542	1.23301 0.91974
N	-0.37203	-0.01415 0.00323	N	0.00000	0.55885 0.00000	H	1.62208	-0.01008 -0.00602	H	-1.42486	-0.01641 -0.01193
H	-2.42586	-0.00213 0.00065	H	-0.06843	2.74808 0.00000	C	0.55658	-0.01196 -0.00569	C	-0.35957	-0.01360 -0.00561
Cl	-3.71280	0.00608 -0.00139	C	-0.10164	3.81466 0.00000	N	0.57849	-0.00978 -0.00815	N	0.77597	-0.01041 -0.00513
			N	-0.13676	4.95138 0.00000	H	-2.63138	-0.00163 -0.00142	H	2.96418	-0.00734 -0.00036
						Cl	-3.91833	0.00349 0.00278	C	4.03121	0.00094 0.00173
									N	5.16840	0.00987 0.00395

Valores de parâmetros eletrônicos (energia, dipolo e energia vibracional do ponto zero) dos complexos $C_nH_m \cdots HCN \cdots HX$ (I, II, III e IV) obtidos através da aplicação do nível de teoria BHandHLYP/6-311++G(d,p)

Tabela 2S. Parâmetros teóricos de energia dos clusters trimoleculares $C_nH_m \cdots HCN \cdots HX$

I	II	III	IV
E = -631,522545 Hartree	E = -264,1030178 Hartree	E = -632,7769369 Hartree	E = -265,3573882 Hartree
Dipolo (μ) = 6,1119 Debye	Dipolo = 7,7278 Debye	Dipolo = 6,1451 Debye	Dipolo = 7,7593 Debye
ZPE = 145,1770 kJ.mol ⁻¹	ZPE = 169,3772 kJ.mol ⁻¹	ZPE = 209,6692 kJ.mol ⁻¹	ZPE = 233,8712 kJ.mol ⁻¹

*e-mail: boazgaldino@gmail.com