Projecte per beques d'estiu 2016

Dades del projecte:

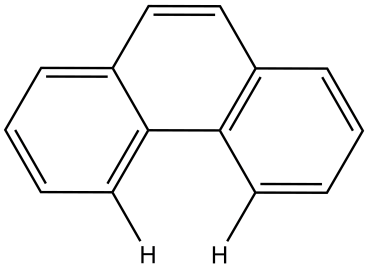
Títol:	Interaccions H···H en el Kekulè. Atractives o repulsives?
Supervisor:	Dr. Miquel Solà
E-mail supervisor:	miquel.sola@udg.edu
Grup de recerca:	DIMOCAT
Destinat a estudiants:	3r i 4t any
Lloc de treball:	Fac. Ciències
Places ofertes:	1 (3r any) i 1 (4t any)
Data d'inici:	a concretar amb l'estudiant
Data d'acabament:	a concretar amb l'estudiant
Seguiment:	Setmanal

Coneixements específics que ha de tenir l'estudiant:
Haver cursat alguna assignatura on l'estudiant hagi fet servir algun programa de càlcul de química quàntica (Principis de reactivitat química, Experimentació en Química Física o altres)

Estudis en curs requerits:
Tercer o Quart

Formació que adquirirà l'estudiant en realitzar aquesta activitat:
Aprendrà a utilitzar el programa Gaussian 09 per càlculs mecanoquàntics i s'iniciarà en les tècniques d'estudi de l'enllaç químic com ara QTAIM, ELF o NCI.

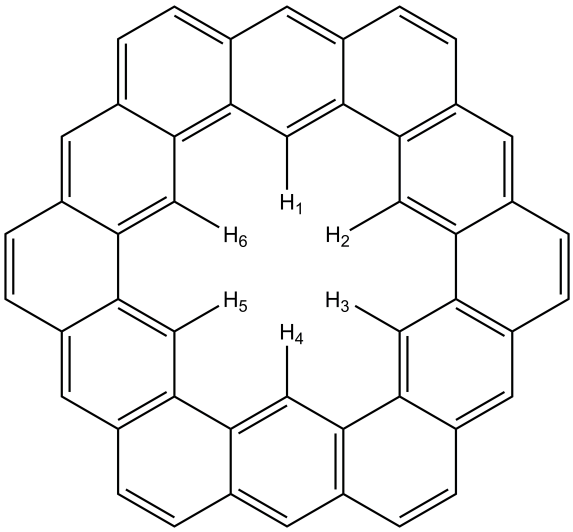
Descripció de l'activitat que ha de fer l'estudiant:
L'existència d'interaccions estabilitzants H···H és controvertida.[1-2] Hi ha grups que defensen que en molècules com el fenantrè s'estableixen interaccions favorables H···H entre els H de la regió badia (Esquema 1) que expliquen la major estabilitat del fenantrè davant del antracè.[3] Altres consideren que aquesta interacció és repulsiva.[4]



Esquema 1. Els H de la regió badia del fenantrè.

L'estudi dels biradicals del fenantrè que resulten de la dissociació homolítica de dos àtoms d'H recolzen la idea que es tracta d'una interacció repulsiva.[5] En aquest treball es proposa estudiar els biradicals, triradicals i tetraradicals de la molècula Kekulé[6-7] (Esquema 2). La idea és que arrencant els H_1 i H_2 es perden tres interaccions H···H a curta distància mentre que dissociant els H_1 i H_3 se'n perden quatre. Si les interaccions H···H són repulsives serà més favorable dissociar els H_1 i H_3 que no pas els H_1 i H_2 i a la inversa si es tracta d'interaccions atractives. També dissociant els H_1, H_2 i H_3 es perden quatre contactes H···H curts i dissociant els H_1, H_3 i H_5 se'n perden sis. Estudiarem

totes les possibles combinacions de possibles dissociacions de dos, tres i quatre enllaços C–$H_{(1-6)}$ per concloure si les interaccions H···H en el Kekulè són atractives o repulsives.



Esquema 2. Els àtoms d'hidrogen de la regió interna del Kekulè.

Referències

1. Bader, R. F. W., Pauli Repulsions Exist Only in the Eye of the Beholder. *Chem. Eur. J.* **2006**, *12*, 2896-2901.
2. Poater, J.; Solà, M.; Bickelhaupt, F. M., A Model of the Chemical Bond Must Be Rooted in Quantum Mechanics, and Possess Predictive Power. *Chem. Eur. J.* **2006**, *12*, 2889-2905.
3. Matta, C. F.; Hernández-Trujillo, J.; Tang, T.-H.; Bader, R. F. W., Hydrogen-Hydrogen Bonding: A Stabilizing Interaction in Molecules and Crystals. *Chem. Eur. J.* **2003**, *9*, 1940-1951.
4. Poater, J.; Visser, R.; Solà, M.; Bickelhaupt, F. M., Polycyclic Benzenoids. Why Kinked Is More Stable Than Straight. *J. Org. Chem.* **2007**, *72*, 1134-1142.
5. Poater, J.; Bickelhaupt, F. M.; Solà, M., Didehydrophenanthrenes: Structure, Singlet–Triplet Splitting, and Aromaticity. *J. Phys. Chem. A* **2007**, *111*, 5063-5070.
6. Jiao, H.; Schleyer, P. v. R., Is Kekulene Really Superaromatic? *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1996**, *35*, 2383-2386.
7. Staab, H. A.; Diederich, F.; Krieger, C.; Schweitzer, D., Cycloarenes, a New Class of Aromatic Compounds, Ii. Molecular Structure and Spectroscopic Properties of Kekulene. *Chem. Ber.* **1983**, *116*, 3504-3512.