Cálculo da Transferência de cargas em complexos envolvendo Sulfeto de Hidrogênio e Gases nobres

Alan Leone de Araújo Oliveira(PG)¹, Henrique Vieira Rivera Vila (PQ)¹, Luiz Guilherme Machado de Macedo², Ricardo Gargano(PQ)¹
kurumimleone@gmail.com¹, gargano@unb.br³

¹ Instituto de Física, Universidade de Brasília, 70910-900. Brasília, Brasil

² Instituto de Ciências Biológicas, Universidade Federal do Pará,

Palavras-chave: Hidrogênio, Sulfeto, Argônio

O conhecimento dos efeitos de transferência de carga em interações intermoleculares fracas (tipo van der Waals) envolvendo moléculas hidrogenadas e gases nobres, podem auxiliar na descrição completa e detalhada da natureza da ligação de hidrogênio [1]. Tal relação requer uma descrição do equilíbrio crítico das componentes de interação eletrostática, transferência de carga, indução, dispersão e troca. O presente trabalho consiste em realizar um estudo detalhado da transferência de carga entre complexos formados por moléculas hidrogenadas e gases nobres, tais como H₂S-Ng, com Ng=He, Ne, Ar, Kr, Xe e Rn. A transferência de carga é também crucial para desenvolver modelos para a descrição dos campos de força que operam em sistemas complexos de interesse tecnológico e biológico. O deslocamento de carga (DC) é dado ao longo de uma dada direção “z”, expresso pela equação:

$$\Delta q(z) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^z \Delta \rho(x, y, z') dz'$$

onde $\Delta \rho$ é a diferença de densidade eletrônica. Em resultados preliminares realizados para o complexo H₂S-Ar, determinamos o DC ao longo do eixo “z” descrito na figura abaixo. A partir dessa figura, foi possível observar uma pequena densidade de elétrons fluindo do átomo de argônio para a molécula de sulfeto de hidrogênio.

Com estes cálculos espera-se conhecer com detalhes a partição das forças intermoleculares envolvidas nestes tipos de sistemas. Tais resultados estão em um excelente acordo com os disponíveis na literatura, consolidando os métodos e estratégias adotados no presente trabalho.

Agradecimentos:

Este trabalho foi apoiado pela CAPES, CNPq e FAPDF.

Referências

- 1.G. Desiraju, T. Steiner, The Weak Hydrogen Bond in Structural Chemistry and Biology, Oxford University Press, Oxford, 1999.

a)

b)

a) Transferência de carga do átomo de argônio para a molécula H_2S considerando o complexo $\text{H}_2\text{S-Ar}$ na conformação de mínima energia, onde a origem do eixo-z encontra-se no átomo de enxofre; b) Gráfico do deslocamento de carga em cada ponto ao longo do eixo-z.