

Ligação Química
1º Semestre de 2019

5ª Prática – A ligação de hidrogênio na água
17 de maio

- Objetivos

Determinação das principais características de uma ligação de hidrogênio, pelo uso do método NBO (Natural Bond Orbitals).

Desenvolvimento

a) Otimização de geometria do dímero da água:

- Usando o arquivo *h2o_2_opt.com*, otimize a geometria e calcule as frequências vibracionais, usando o comando *g09 h2o_2_opt*. Qual é o método e a função de base?
- Liste os coeficientes de contração e os expoentes das funções de base de valência, de polarização e das difusas.
- Usando o software *jmol*, determine os comprimentos e ângulos de ligação e visualize os modos normais de vibração. Compare os estiramentos simétricos e assimétricos desse dímero com aqueles da molécula de água. Compare os estiramentos que envolvem o hidrogênio que participa da ligação de hidrogênio com aqueles que não estão envolvidos nessa interação. Justifique os resultados.

b) Cálculo NBO e dos orbitais moleculares para a água

- Usando o arquivo *h2o_nbo.com*, realize a análise NBO usando *g09 h2o_nbo*.
- Usando o programa *jmol*, abra o arquivo dos orbitais moleculares, *h2o.40*. Abra o console e digite os comandos: *background white; mo mesh nofill; mo cutoff 0.04; mo 1*. Repita para todos os orbitais ocupados. Identifique quais são os orbitais que refletem a ligação de hidrogênio.
- Abra o arquivo de saída do cálculo NBO e obtenha:
 - as cargas atômicas naturais (NPA),
 - a configuração eletrônica natural (NEC),
 - a porcentagem de contribuição da estrutura de Lewis,
 - os NBOs ligantes (BD), anti-ligantes (BD*) e de par isolado (LP).
 - As interações de segunda ordem.
 - As estruturas de ressonância.
 - As ordens de ligação naturais.
- Como esses valores se alteram da molécula de água para o dímero.
- A partir da análise das interações de segunda ordem, identifique qual será a interação que estabilizará a ligação de hidrogênio.

