

A. Ciências Exatas e da Terra - 4. Química - 7. Química Orgânica

Análise conformacional e estudo de ligações de hidrogênio intramoleculares em flúor-fenóis.

Marilua Azevedo Moreira¹

Josué M. Silla²

Matheus Puggina de Freitas³

1. IC 5º período

2. IC 8º período

3. Prof. Dr-DQI/UFLA.-Orientador

RESUMO:

As ligações de hidrogênio são entendidas como ligações mais fracas que uma ligação química comum e podem ser encontradas em fase sólida, líquida e gasosa. Geralmente, ela se dá quando ocorre uma interação entre o átomo de H e um átomo de A (A = O, F, N, etc.), em que H possui uma carga positiva e A uma carga negativa (parcial ou integral). As ligações de hidrogênio envolvendo átomos de uma mesma molécula são chamadas ligações de hidrogênio intramoleculares, tendo papel fundamental na estabilização dessas moléculas. As ligações de hidrogênio intramoleculares interferem na estabilidade conformacional da molécula, dessa forma o projeto propõe um estudo teórico (computacional); a sonda para avaliar esse fenômeno é a constante de acoplamento $1J(O)H...X$ (X = F e H(O)) e os compostos modelo são orto, meta e para flúor-fenóis. Construíram-se as superfícies de energia potencial em nível HF/-6-31g(d,p), e determinaram-se os conformeros mais estáveis (mínimos de energia) para os compostos. As superfícies foram obtidas variando-se o ângulo diedro H-O-C-C e avaliando-se a alteração da energia da molécula. Os mínimos de energia das superfícies foram otimizados em nível MP2/aug-cc-pVDZ. Destaque foi observado para um mínimo de energia acentuado no isômero orto, que não se destaca para os isômeros meta e para; ele se deve à ocorrência de ligação de hidrogênio intramolecular OH...F, responsável pela estabilização do conformero por cerca de 2.8 kcal mol⁻¹. Os trabalhos futuros serão: construção de superfícies de $1J(O)H...X$ em função da rotação do ângulo diedro H-O-C-C, em nível B3LYP/EPR-III; obtenção das constantes de acoplamento $1J(O)H...X$ para os mínimos otimizados, em nível B3LYP/EPR-III; realização de cálculos NBO para avaliar as interações hiperconjugativas que operam nos mínimos de energia e que são responsáveis pelas constantes de acoplamento via ligação de hidrogênio intramolecular, com ênfase à interação LPx → s*O-H e a construção de superfícies de energia de interação LPx → s*O-H em função da rotação do(s) ângulo(s) diedro(s) H-O-C-C, em nível B3LYP/aug-cc-pVDZ.

Instituição de Fomento: Fapemig

Palavras-chave: Ligações de Hidrogênio, Estabilidade Conformacional, Conformero.