

# Capacidade de deslocamento de ligantes em complexos de hidrogênio por predição de propriedades termodinâmicas e RMN de $^1\text{H}$

Nathália B. D. Lima\*(PG) e José A. A. França(PQ)

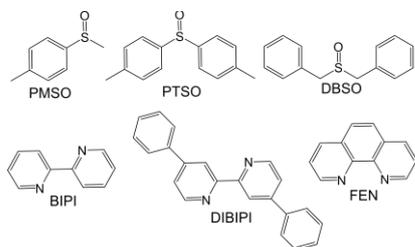
\*nathalia.blima@ufpe.br

Departamento de Química Fundamental, Universidade Federal de Pernambuco, Recife, PE.

Palavras Chave: ligações de hidrogênio, propriedades termodinâmicas, RMN de  $^1\text{H}$ , ligantes orgânicos, ab initio.

## Introdução

Moléculas quando interagem por ligações de hidrogênio podem ter suas propriedades espectroscópicas modificadas após a complexação. Por exemplo, os sinais associados ao deslocamento químico ( $\delta$ ) dos núcleos de hidrogênio, os quais estão diretamente envolvidos nesta interação podem ser blindados após a formação da ligação de hidrogênio<sup>1</sup>, ou seja, são deslocados para menores valores no espectro de RMN de  $^1\text{H}$ . Este trabalho teve como objetivo principal a predição da capacidade de deslocamento de ligantes orgânicos, figura 1, em complexos de hidrogênio por propriedades termodinâmicas, bem como a comprovação experimental da formação destes complexos.



**Figura 1.** Estrutura dos ligantes estudados neste trabalho.

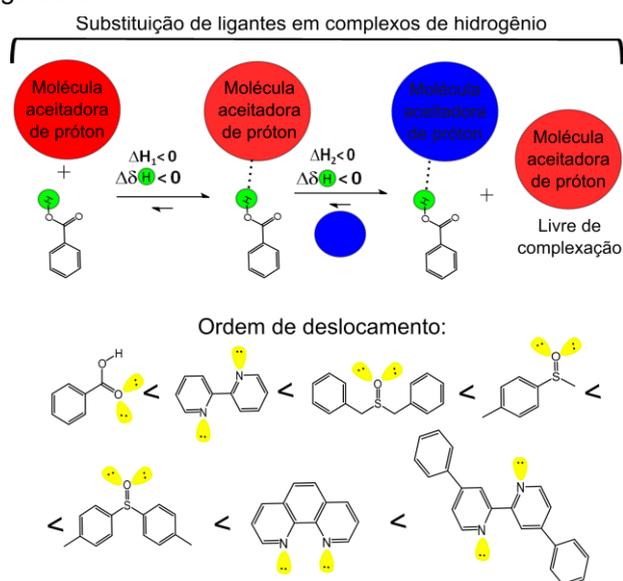
## Resultados e Discussão

Os valores teóricos da variação de entalpia,  $\Delta H$ , bem como os valores experimentais do efeito da complexação no deslocamento químico do núcleo de hidrogênio ácido,  $\Delta\delta\text{H}_1$ , são mostrados na tabela 1.

**Tabela 1.** Valores teóricos de variação de entalpia,  $\Delta H^{\text{Teórico}}$  e valores experimentais do efeito da complexação no deslocamento químico do hidrogênio ácido,  $\Delta\delta\text{H}_1^{\text{Experimental}}$ .

Complexo	$\Delta H^{\text{Teórico}}$ (kJ.mol <sup>-1</sup> )	$\Delta\delta\text{H}_1^{\text{Experimental}}$ (kJ.mol <sup>-1</sup> )
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> COOH...HOCC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	+38.8	0.0
BIPI...HOCC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	-0.2	+0.63
DBSO...HOCC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	-10.2	-0.72
PMSO...HOCC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	-15.5	-1.26
PTSO...HOCC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	-17.5	-0.24
FEN...HOCC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	-24.1	-4.08
DIBIPI...HOCC <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	-24.4	-1.06

A partir destes resultados verificou-se que a formação dos complexos de hidrogênio sempre ocorre quando o valor de entalpia da reação é negativo. Também foi observado que o processo de formação de ligações de hidrogênio ocasiona uma blindagem eletrônica no núcleo do hidrogênio ácido, sendo esta uma evidência da existência desta interação nestes sistemas. A figura 2 ilustra o processo de formação da ligação de hidrogênio em termos da substituição de ligantes orgânicos, bem como a ordem de capacidade de deslocamento dos ligantes.



**Figura 2.** Esquema de reações de substituição de ligantes orgânicos em complexos de hidrogênio e ordem crescente da capacidade de deslocamento dos ligantes.

## Conclusões

Uma série da capacidade de deslocamento de ligantes orgânicos em complexos de hidrogênio foi prevista por propriedades termodinâmicas e a comprovação da formação dos complexos foi obtida a partir de espectros de RMN de  $^1\text{H}$ .

## Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq, ao PRONEX, à FACEPE e ao laboratório do CENAPAD-UFPE.

<sup>1</sup> Lima, N. B. D. e França, A. A., *Comp. & Theo. Chem.*, 2014 (submetido).