

## Estudo teórico envolvendo metanona-bisbenzimidazol (MeBBI)

Fabrizio Gava Menezes (PG), Fabio da Silva Miranda (PG), Juliano Vicente (PG), Norberto Sanches Gonçalves (PQ) e Cezar Zucco (PQ)\*

\*czucco@qmc.ufsc.br

Departamento de Química – Universidade Federal de Santa Catarina - CEP

Palavras Chave: metanona-bisbenzimidazol, estrutura cristalográfica, estudo teórico.

### Introdução

O estudo teórico de compostos químicos tem sido bastante explorado e se mostrado uma ferramenta muito útil para obtenção e compreensão de diversas propriedades químicas.

O objetivo do presente trabalho é apresentar o estudo teórico envolvendo **MeBBI** (Fig. 1a). Serão discutidos os valores de ângulos e comprimentos de ligações experimentais (cristalografia de raio-x) e os teóricos. Também serão discutidas propriedades eletrônicas do **MeBBI**, como densidade de carga com potencial eletrostático, ajuste de cargas e orbitais moleculares (LOMO e HUMO).

### Metodologia

Os cálculos teóricos foram realizados usando a teoria do funcional de densidade, utilizando o método B3LYP, com o conjunto de base 6-31G+ (d,p). Todos os cálculos foram feitos no programa Gaussian 98.

### Resultados e Discussão

O **MeBBI** foi obtido a partir da reação entre metileno-bisbenzimidazol e perclorato de ferro em etanol/água, e teve sua estrutura determinada por cristalografia de raio-x. A tabela 1 apresenta a comparação entre os principais comprimentos de ligação experimentais (obtidos por cristalografia de raio-x) e os teóricos para o **MeBBI**. Nota-se que os valores são bastante semelhantes, com erros relativos menores que 2 %.

**Tabela 1.** Valores experimentais e teóricos de comprimentos de ligação do **MeBBI**, e erro relativo.

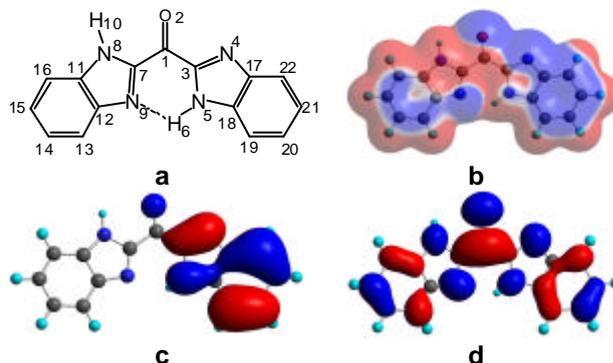
Ligação	Exp. <sup>a</sup> (Å)	Teor. <sup>b</sup> (Å)	Erro (%)
C <sub>1</sub> -O <sub>2</sub>	1,226	1,228	0,16
C <sub>3</sub> -N <sub>4</sub>	1,327	1,322	0,38
C <sub>3</sub> -N <sub>5</sub>	1,358	1,383	1,80
C <sub>7</sub> -N <sub>8</sub>	1,364	1,371	0,51
C <sub>7</sub> -N <sub>9</sub>	1,323	1,324	0,07
N <sub>5</sub> H <sub>6</sub> -N <sub>9</sub> <sup>c</sup>	2,040	2,061	1,02

a: comprimentos de ligação obtidos da estrutura cristalográfica; b: comprimentos de ligação obtidos por cálculo teórico; c: ponte de hidrogênio intramolecular.

Por ambos os métodos foi verificado que o **MeBBI** é uma molécula plana, e os valores dos ângulos entre os carbonos dos grupos bisbenzimidazóis ligados à

carbonila são de 120, 8° (experimental) e 118,9° (teórico). Essa diferença pode ser justificada pelo empacotamento do sólido comparado ao valor obtido no vácuo para o cálculo teórico.

A Fig. 1b apresenta a densidade de carga com potencial eletrostático de 0,02 u.a., indicando que a densidade eletrônica (em azul) predomina sobre os heteroátomos de nitrogênio e oxigênio, além do carbono aromático C<sub>16</sub>. Com relação à densidade positiva (em vermelho), a mesma se localiza principalmente sobre os átomos de hidrogênio ligados a nitrogênios e sobre os carbonos C<sub>1</sub>, C<sub>7</sub> e C<sub>11</sub>. O ajuste de cargas para o **MeBBI** justifica tais informações, uma vez que alguns dos valores são: C<sub>1</sub>(0,448); O<sub>2</sub>(0,-527); C<sub>7</sub>(0,682); N<sub>5</sub>(-0,612); N<sub>8</sub>(-0,435); N<sub>9</sub>(-0,357); H<sub>6</sub>(0,343); H<sub>10</sub>(0,335); C<sub>11</sub>(0,941) e C<sub>16</sub>(-1,304). Os demais valores variam de -0,230 a 0,230.



**Figura 1.** a) estrutura química do **MeBBI**; b) densidade de carga com potencial eletrostático de 0,02 u.a.; c) HOMO; d) LUMO.

A Fig. 1c apresenta o HOMO do **MeBBI** que está localizado em apenas um dos anéis, enquanto a figura 2d apresenta o LUMO que se espalha por toda a molécula.

### Conclusões

Os cálculos teóricos apresentam boa correlação entre os principais ângulos e comprimentos de ligação comparados com os valores experimentais, e ajudam a entender as propriedades eletrônicas do **MeBBI**.

### Agradecimentos

UFSC, CAPES, CNPq