

INFLUÊNCIA DA LIGAÇÃO DE HIDROGÊNIO F-H...N NO ESTIRAMENTO ISOLADO C-H EM AZINAS AROMÁTICAS

Victor H. Rusu* (IC), João Bosco P. da Silva (PQ), Mozart N. Ramos (PQ).

victorusu@gmail.com

Departamento de Química Fundamental, Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), 50739-901, Recife (PE), Brasil.

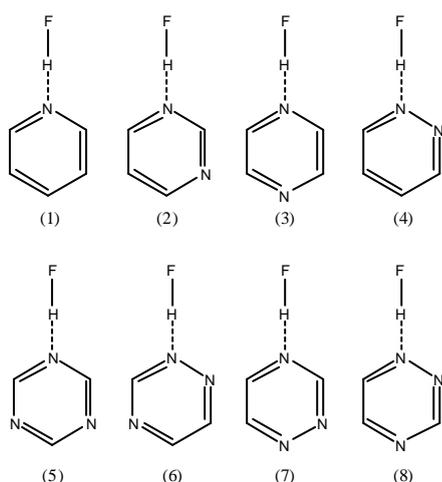
Palavras Chave: Azinas, *Ab initio*, Infravermelho, Deuteração seletiva, Ligação de Hidrogênio.

Introdução

Cálculos de orbitais moleculares *ab initio* revelaram que a frequência vibracional e a intensidade de estiramento C-H no infravermelho podem ser úteis para refletir o grau de aromaticidade de compostos aromáticos [1]. Estes cálculos mostraram que quanto maior a aromaticidade, maior será a intensidade de estiramento C-H e menor será a sua frequência vibracional.

Neste trabalho, as azinas aromáticas, indicadas a seguir, foram complexadas usando como doador de prótons HF, em princípio para analisar e quantificar o efeito da ligação de hidrogênio F-H...N sobre a frequência vibracional e a intensidade no infravermelho do oscilador CH isolado. Para isolar este oscilador, nós fizemos uso do procedimento de deuteração seletiva, onde todos os átomos de hidrogênio foram deutérios, exceto àquele ligado ao carbono adjacente ao nitrogênio complexado. Neste estudo, nós empregamos uma função de onda com o nível de cálculo MP2 e conjunto de base 6-31++G** usando o Programa GAUSSIAN.

Figura 1. Sistemas estudados.



Resultados e Discussão

Nossos resultados mostram claramente que a complexação produz uma redução média nas intensidades de estiramento CH de 6,4 Km.mol⁻¹ e um aumento médio em suas frequências vibracionais

de 14 cm⁻¹, sugerindo uma perda de aromaticidade devido à complexação, conforme se pode notar na tabela 1.

Colocar tabela 1 aqui.

Conclusões

O aumento da frequência vibracional está de acordo com o que se espera classicamente, menor aromaticidade, maior a força da ligação C-H (por exemplo, C₂H₄ e C₂H₆); enquanto a redução das intensidades decorre do fato de que o fluxo de carga C-H associada à intensidade de estiramento C-H se torna menos negativo após a complexação.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio financeiro do CNPq.

¹ S.E. Galembeck, N.B. da Costa Jr., M.N. Ramos e B.B. Neto, *J. Mol. Struct. (Theochem)*, **1993**, 282, 97.

Tabela 1. Frequências e intensidades de estiramento no infravermelho do oscilador isolado C-H em azinas aromáticas antes e após complexação com H-F.

Compl exo	$\nu_{\text{C-H}}^{\text{C}}$ (cm ⁻¹)	$\nu_{\text{C-H}}^{\text{D}}$ (cm ⁻¹)	$\Delta\nu$ (cm ⁻¹)	$A_{\text{C-H}}$ (Km mol ⁻¹)	$A_{\text{C-H}}^{\text{D}}$ (Km mol ⁻¹)	ΔA (Km mol ⁻¹)
(1)	3251	3267	16	17,0	5,3	-11,7
(2)	3256	3270	14	12,9	3,6	-9,3
(3)	3260	3275	15	12,4	3,5	-8,9
(4)	3270	3279	9	7,5	1,0	-6,5
(5)	3276	3284	8	9,2	2,7	-6,5
(6)	3280	3287	7	4,3	1,9	-2,4
(7)	3280	3288	8	4,3	1,8	-2,5
(8)	3280	3286	6	4,3	0,6	-3,7