

Um Estudo da Topologia Molecular dos Complexos de Hidrogênio $C_2H_4O \cdots HF$ e $C_2H_5N \cdots HF$ Utilizando a Teoria QTAIM.

Boaz G. Oliveira^{*1}(PQ), Regiane C.M.U. Araújo¹(PQ), Antônio B. Carvalho¹(PQ), Mozart N. Ramos²(PQ)

* E-mail: boazgaldino@gmail.com

¹Departamento de Química, Universidade Federal da Paraíba, 58036-300, João Pessoa – PB.

²Departamento de Química Fundamental, Universidade Federal de Pernambuco, 50739-901, Recife – PE.

Palavras Chave: Complexos de hidrogênio, B3LYP, QTAIM.

Introdução

Muitos dos métodos cristalográficos e espectroscópicos são utilizados no estudo de sistemas formados através de ligações de hidrogênio. A aplicação destes procedimentos experimentais tem por objetivo caracterizar fenômenos decorrente do contato entre um hidrogênio (H) e um centro contendo alta densidade eletrônica (Y = F, O, N, S, ligações π e pseudo- π). Pela mecânica quântica, é bem estabelecido que a metodologia QTAIM (do inglês *Quantum Theory of Atoms in Molecules*)¹ tem se mostrado como uma ferramenta clara e eficiente não apenas para identificar e caracterizar interações de natureza intra e/ou intermolecular, mas também no estudo atômico elementar de como os átomos se comportam quando ocorre a formação de ligações covalentes ou insaturadas. Conforme a equação (1), os operadores energia cinética (K) e potencial (U) da densidade eletrônica são utilizados para identificar Pontos Críticos nas Ligações químicas ou BCP (do inglês *Bond Critical Point*). A partir da determinação dos BCP, máximos e mínimos de concentração de carga são calculados, caracterizando as ligações químicas como interação compartilhada ($\nabla^2\rho < 0$) ou como camada fechada ($\nabla^2\rho > 0$).

$$\frac{1}{4} \nabla^2\rho = 2K + U \quad (1)$$

As interações compartilhadas podem ser exemplificadas por ligações covalentes ou π , enquanto as camadas fechadas representam as interações inter ou intramoleculares como as ligações de hidrogênio. Como objetivo deste trabalho, admitimos que os parâmetros QTAIM possam ser utilizados para caracterizar as ligações de hidrogênio (Y...H) com Y = O e N nos complexos $C_2H_4O \cdots HF$ e $C_2H_5N \cdots HF$, respectivamente.

Resultados e Discussão

De acordo com os resultados apresentados na Tabela 1, comprovamos a formação dos complexos de hidrogênio $C_2H_4O \cdots HF$ e $C_2H_5N \cdots HF$ pois todos os valores do Laplaciano $\nabla^2\rho(Y \cdots HF)$ são positivos na região intermolecular. Em contrapartida, as ligações HF também foram caracterizadas, mas como sendo interações covalentes. Isso pode ser verificado

pelos baixos valores de densidade eletrônica de 0,046 e/a₀³ e 0,062 e/a₀³ nas ligações de hidrogênio (Y...HF), como também pelo acúmulo de carga na ligação HF. A Figura 1 ilustra o mapa da superfície de densidade eletrônica do complexo $C_2H_4O \cdots HF$. É a partir deste mapa de densidade eletrônica, que os parâmetros ρ e $\nabla^2\rho$ são calculados

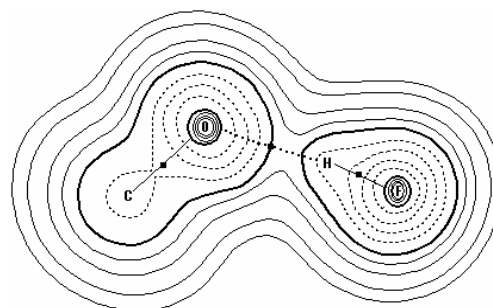


Figura 1. Representação dos mapas de contorno da densidade eletrônica do complexo de hidrogênio $C_2H_4O \cdots HF$.

Tabela 1. Parâmetros topológicos QTAIM dos complexos de hidrogênio $C_2H_4O \cdots HF$ e $C_2H_5N \cdots HF$.

Parâmetros QTAIM	Complexos de hidrogênio	
	$C_2H_4O \cdots HF$	$C_2H_5N \cdots HF$
$\rho(Y \cdots HF)$	0,046	0,062
ρ_{HF}	0,335	0,311
$\nabla^2\rho(Y \cdots HF)$	0,149	0,116
$\nabla^2\rho_{HF}$	-2,432	-2,110

*Valores de ρ e $\nabla^2\rho$ em e/a₀³ e e/a₀⁵ respectivamente.

Conclusões

Através dos baixos valores de densidade eletrônica ρ (0,046-0,062 e/a₀³) e dos resultados positivos para o campo Laplaciano $\nabla^2\rho$ (0,149-0,116 e/a₀⁵), a teoria QTAIM caracterizou as ligações de hidrogênio (Y...HF) nos complexos de hidrogênio $C_2H_4O \cdots HF$ e $C_2H_5N \cdots HF$ como interações de camada fechada.

Agradecimentos

CNPq, CAPES e FACEPE.

¹Bader, R.F.W.; *Chem. Rev.* **1991**, *91*, 893.

²Oliveira, B.G.; Araújo, R.C.M.U.; Carvalho, A.B.; Ramos, M.N.; *J. Mol. Model.* doi: **10.1007/s00894-008-0380-2**.