

Análise conformacional e estudo de ligações de hidrogênio intramoleculares em flúor-naftóis

Marilua A. Moreira (IC)^{1*}, Fátima M. P. de Rezende (IC)¹, Josué M. Silla (IC)¹, Matheus P. de Freitas (PQ)¹

* mariluamoreira@yahoo.com.br

1-Departamento de Química, Universidade Federal de Lavras, CP 3037, 37200-000, Lavras-MG

Palavras Chave: Ligações de hidrogênio, análise conformacional, estabilidade

Introdução

A ligação de hidrogênio é uma interação, inter ou intramolecular, que ocorre entre um hidrogênio deficiente de elétrons (por exemplo, numa espécie HX, onde se considera o hidrogênio formando uma ligação química com o átomo X, mais eletronegativo do que hidrogênio) e uma região de alta densidade eletrônica. A ligação de hidrogênio intramolecular ocorre quando uma mesma molécula apresenta, simultaneamente, um grupo doador e um grupo receptor de próton, em configuração espacial favorável, e podem ser forças determinantes do isomerismo conformacional.¹ Sendo assim, o presente trabalho teve como objetivo verificar como as ligações de hidrogênio intramoleculares envolvendo o grupo hidroxila e o átomo de flúor em flúor-naftóis influenciam na estabilidade conformacional do composto modelo.

Resultados e Discussão

Superfícies de energia potencial foram calculadas em nível HF/6-31g(d, p) para os compostos em estudo (Figura 1) com a finalidade de se determinar os conformêros mais estáveis. Os mínimos de energia foram então otimizados em nível MP2/aug-cc-pVDZ. Os cálculos foram otimizados utilizando o programa Gaussian 03W.⁴

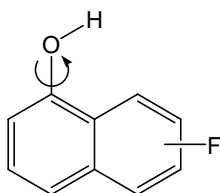


Figura 1: Flúor-naftol (α , β e γ).

Através da construção das superfícies de energia potencial (PES, Figura 2), obtiveram-se os mínimos de energia dos α , β e γ -flúor naftóis. Cada mínimo de energia obtido das PES foi otimizado, e os parâmetros energéticos e estruturais mais importantes dos compostos são mostrados na Tabela 1.

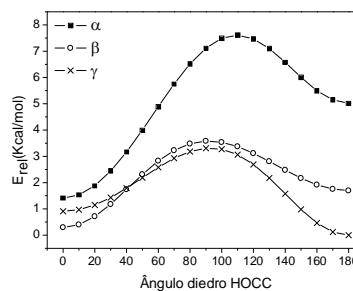


Figura 2: PES para α , β e γ -flúor naftóis.

Tabela 1: Energias relativas (Kcal mol^{-1}) e ângulos diedros H-O-C-C para os conformêros otimizados dos flúor-naftóis.

Isômero	θ (H-O-C-C)	E_{rel} (kcal mol^{-1})
α	0.0	2.3
α	180.0	5.4
β	0.0	0.1
β	180	1.3
γ	0.0	0.7
γ	180.0	0.0

Destaque foi observado para um mínimo de energia acentuado no isômero α , que não se destaca para os isômeros β e γ . Ele se deve à ocorrência de ligação de hidrogênio intramolecular OH...F, responsável pela estabilização do conformêro com diedro HOCC = 0° por cerca de $3.1 \text{ kcal mol}^{-1}$.

Conclusões

A ligação de hidrogênio OH...F é operante no 2-flúor-naftol e contribui significativamente para o isomerismo conformacional desse composto. Dessa forma, pode-se inferir que interações similares, inclusive intermoleculares, como num sistema enzima-substrato, contribuem para a estabilidade da molécula ou do complexo formado.

Agradecimentos

À FAPEMIG pela bolsa de iniciação científica.

¹ Silva, J. J. S. Dissertação de mestrado, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, 2006.

² Frisch, M. J. *et al.* Gaussian 03W, Gaussian Inc., Pittsburgh PA, 2003.