

Um estudo *AB initio* das propriedades moleculares dos complexos de hidrogênio envolvendo 3-aminoftalimida e HF

Márcia K.D.L. Belarmino (IC), Nathália B. D. Lima (PG)*, Mozart N. Ramos (PQ)

nathalia.blima@ufpe.br

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

Palavras Chave: Ligação de hidrogênio, *AB initio*, 3-aminoftalimida.

Introdução

Nos últimos anos, as imidas cíclicas vêm sendo bastante estudadas por possuírem várias atividades biológicas, as quais apontam para um potencial uso farmacêutico. Dentre estas propriedades, destacam-se as atividades anti-inflamatória, antimicrobiana e antitumoral. Também é interessante ressaltar, que as imidas cíclicas podem atuar tanto como aceptora quanto doadora de prótons. Neste sentido, nós estudamos neste trabalho as propriedades moleculares de complexos de hidrogênio envolvendo 3-aminoftalimida e HF¹. Para isto, empregamos cálculos *ab initio* MP2/6-31++G(d,p) e B3LYP/6-31++G(d,p) para determinar não só as possíveis estruturas destes complexos, mas também para interpretar as mudanças mais significativas em suas propriedades eletrônicas e vibracionais devido a complexação.

Resultados e Discussão

Na Figura 1 mostramos as estruturas otimizadas dos complexos para os sistemas formados entre 3-aminoftalimida e HF.

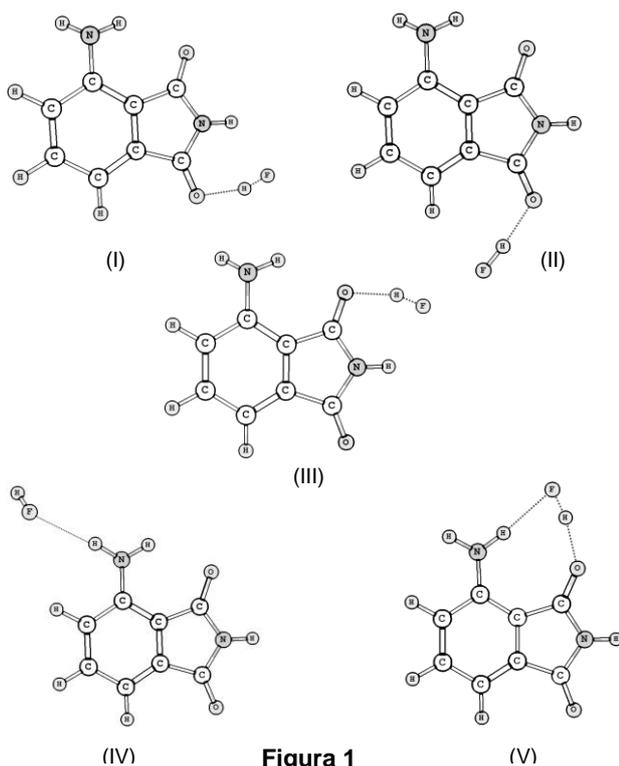


Figura 1

Na tabela 1 nós mostramos as energias de estabilidade com e sem correções ZPE e BSSE e a variação do momento dipolar devido à formação das ligações de hidrogênio.

Tabela 1. Valores MP2 e B3LYP (em parêntesis) da energia sem correção (ΔE), energias de estabilização após correções BSSE e ZPE (ΔE^c) e variação do momento de dipolo ($\Delta\mu$).

Complexos	ΔE , kJ.mol ⁻¹	ΔE^c , kJ.mol ⁻¹	$\Delta\mu$, (D)
(I)	47.6 (49.2)	34.6 (41.0)	0.99 (1.33)
(II)	44.6 (46.6)	31.9 (35.7)	-0.96 (0.09)
(III)	46.7 (49.0)	33.4 (38.3)	1.10 (1.05)
(IV)	14.3 (11.8)	7.7 (7.9)	0.20 (1.10)
(V)	44.3(46.5)	32.1 (34.0)	-2.00 (-2.28)

Podemos verificar que em particular, exceto para o complexo IV, a formação da ligação de hidrogênio, produz um importante deslocamento para baixo na frequência do estiramento H-F ($\Delta\nu_{\text{HF}}$) e um aumento acentuado em sua intensidade no infravermelho ($A_{\text{HF}}^C/A_{\text{HF}}^{\text{is}}$), como mostra a tabela 2.

Tabela 2. Valores MP2 e B3LYP (em parêntesis) do deslocamento de frequência ($\Delta\nu_{\text{HF}}$) e razão das intensidades ($A_{\text{HF}}^C/A_{\text{HF}}^{\text{is}}$) do estiramento H-F.

Complexos	$\Delta\nu_{\text{HF}}$	$A_{\text{HF}}^C/A_{\text{HF}}^{\text{is}}$
(I)	-606 (-747)	8.8 (13.0)
(II)	-488 (-643)	9.5 (12.4)
(III)	-604 (-756)	9.3 (14.0)
(IV)	-31 (-24)	1.6 (1.5)
(V)	-541 (-852)	5.3 (11.7)

Conclusões

Nossos cálculos mostram que cinco diferentes complexos podem ser formados envolvendo 3-aminoftalimida e HF. Em particular, as frequências do estiramento H-F deslocam para menores valores e suas respectivas intensidades são aumentadas.

Agradecimentos

Os autores agradecem a CAPES e ao CNPq pelo suporte financeiro.

¹ Belarmino, M.K.D.L.; Lima, N.B.D.; J. Mol. Struc. (submetido), 2012.