

# Ligações de hidrogênio envolvendo pirazina e RCOOH (R= -H, -CH<sub>3</sub> e -C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>): Um estudo teórico computacional

Renata X. D. Nascimento (IC)\*, Nathália B. D. Lima (PG), Mozart N. Ramos (PQ)

renata.xaviernascimento@ufpe.br

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

Palavras Chave: Ligação de hidrogênio, B3LYP, pirazina, ácido carboxílico.

## Introdução

É bem conhecido que pirazina pode formar complexos estáveis de ligação de hidrogênio. Estudos<sup>1</sup> têm revelado que a pirazina ao interagir com ácidos lineares monoprotônicos nas proporções 1:1 e 1:2, além de formar complexos estáveis, a mono quanto a dupla complexação resultam em mudanças significativas nas propriedades da pirazina e dos ácidos. Nesse sentido, nós estamos agora interessados em compreender como a mono e a dupla complexação na pirazina com diferentes ácidos carboxílicos (RCOOH (R= -H, -CH<sub>3</sub> e -C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>)) podem afetar as propriedades moleculares isoladas. Para isto, realizamos cálculos B3LYP/6-31++G(d,p) com o programa Gaussian 03 para obter suas energias de estabilização, geometrias moleculares e as mudanças moleculares que ocorrem nas moléculas isoladas após a complexação.

## Resultados e Discussão

Na Figura 1 mostramos as estruturas otimizadas dos complexos para os sistemas formados entre pirazina e RCOOH, nas proporções 1:1 e 1:2.

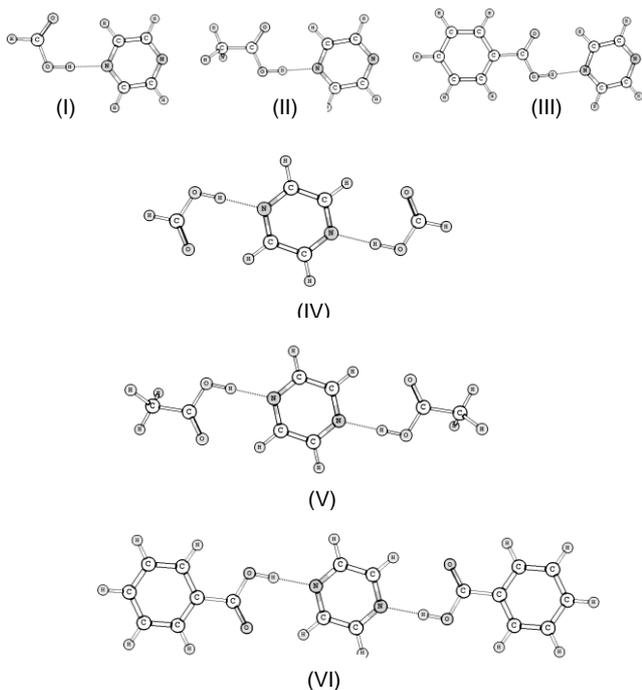


Figura 1

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 da energia sem correção ( $\Delta E$ ), energias de estabilização após correções BSSE e ZPE ( $\Delta E^c$ ) e variação do momento de dipolo ( $\Delta\mu$ ).

Complexos	$\Delta E$ , kJ.mol <sup>-1</sup>	$\Delta E^c$ , kJ.mol <sup>-1</sup>	$\Delta\mu$ , (D)
(I)	45.0	37.5	0.23
(II)	41.6	37.3	0.49
(III)	42.2	35.7	-0.60
(IV)	43.9	37.0	-3.06
(V)	41.2	34.2	-4.54
(VI)	41.5	35.5	-4.34

É interessante verificar que a formação da ligação de hidrogênio, produz um importante deslocamento para baixo na frequência do estiramento OH ( $\Delta\nu_{OH}$ ) e um aumento acentuado em sua intensidade no infravermelho ( $A^c_{OH}/A^{is}_{OH}$ ), como mostra a tabela 2.

**Tabela 2.** Deslocamento de frequência ( $\Delta\nu_{OH}$ ) e razão das intensidades ( $A^c_{OH}/A^{is}_{OH}$ ) do estiramento O-H em parêntesis.

Complexos	$\Delta\nu_{OH}$	$\Delta\nu_{OH,Ass}$	$\Delta\nu_{OH,Sim}$
(I)	-716(52.0)	----	----
(II)	-627(33.9)	----	----
(III)	-662(29.4)	----	----
(IV)	----	-634 (60.0)	-677 (45.0)
(V)	----	-586 (53.2)	-577(14.0)
(VI)	----	-618(62.0)	-596(10.0)

## Conclusões

Nossos cálculos mostram que os complexos envolvendo pirazina e RCOOH correspondem a pontos de mínimo na curva de superfície de potencial. As frequências do estiramento O-H deslocam para menores valores e suas respectivas intensidades são consideravelmente aumentadas.

## Agradecimentos

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

<sup>1</sup> Rusu, Victor H. ; Ramos, Mozart N. ; Da Silva, João Bosco P., International Journal of Quantum Chemistry, v. 106, p. 2811-2817, 2006.