

O emprego da Teoria Quântica de Átomos em Moléculas no estudo da ligação de hidrogênio entre o benzeno e espécies HF, HCN, H₂O e NH₃.

José Alberto Maia Neto¹ (IC)*, Jéssica Nayara M. Silva¹ (IC), Alain Charles M. Alves¹ (IC), Jefferson José S. Silva¹ (PG), Aline F. Bezerra¹ (PG), Regiane C M U Araújo¹ (PQ)¹.

¹Universidade Federal da Paraíba

*jamaianeto@hotmail.com

Palavras Chave: MP2, QTAIM, Ligação de hidrogênio.

Introdução

A caracterização da uma interação fraca do tipo ligação de hidrogênio tem sido alvo de numerosos estudos teóricos e experimentais. Uma técnica bastante utilizada nos últimos anos para caracterizar a formação de uma ligação de hidrogênio é a Teoria Quântica de Átomos em Moléculas (QTAIM) proposta por Bader. A QTAIM tem se consolidado como uma metodologia com amplo espectro de aplicações no estudo dos mais variados sistemas. Neste trabalho, o emprego da Teoria Quântica de Átomos em Moléculas nos possibilitou determinar os Pontos Críticos de Ligação (BCP) e os Pontos Críticos de Anel (RCP) dos complexos de hidrogênio C₆H₆-HX, com X=F, CN, OH e NH₂. Foram obtidos os valores de densidade eletrônica e do laplaciano da densidade eletrônica nos pontos críticos de ligação dos sistemas investigados. A análise topológica e a avaliação de parâmetros como a densidade eletrônica, $\rho(\vec{r})$, e o Laplaciano da densidade eletrônica, $\nabla^2\rho(\vec{r})$, determinam a estabilidade molecular, auxiliando na identificação das regiões espaciais onde $\rho(\vec{r})$ é localmente concentrada ou depressiva, em qualquer ponto da ligação química. Estas propriedades foram obtidas neste trabalho empregando os programas MORPHY98 ou AIM2000 1.0. Dessa forma, a ligação química pode ser classificada em termos desses parâmetros, em duas classes:

- interação compartilhada: $\nabla^2\rho(\vec{r}) < 0$, ligações covalentes;
- interação da camada fechada: $\nabla^2\rho(\vec{r}) > 0$, ligações de hidrogênio.

Resultados e Discussão

De acordo com a teoria quântica de átomos em moléculas, quando ocorre a formação de uma ligação de hidrogênio, no ponto crítico de ligação deve ocorrer uma interação entre o átomo de hidrogênio da espécie HX e o receptor de próton, benzeno, os quais são unidos por uma linha intermolecular. Os BCP's possuem propriedades típicas de interações de camada fechada, onde o valor de $\rho(\vec{r})$ é relativamente baixo e o Laplaciano da densidade eletrônica, $\nabla^2\rho(\vec{r})$

35ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

> 0, indicando a presença da ligação de hidrogênio intermolecular, Benzeno...H-X. A partir das estruturas ilustradas na Figura 1 é possível confirmar a presença dos BCP's entre os átomos de carbono do benzeno e o hidrogênio da espécie HX (pontos na cor vermelha) para H₂O e HCN. É possível verificar ainda a presença do ponto crítico de anel no centro do anel benzênico (ponto na cor amarela).

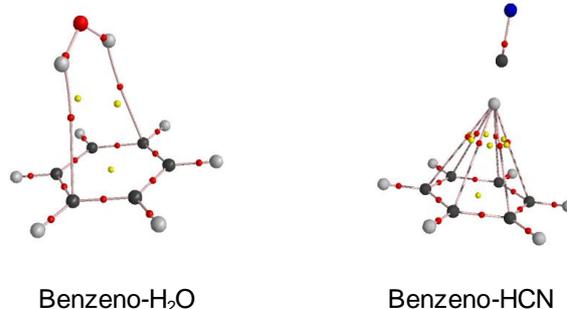


Figura 1. Ilustração dos BCP's e RCP's nos complexos de hidrogênio caracterizando a ligação de hidrogênio intermolecular na conformação fechada.

Os baixos valores de densidade eletrônica entre as ligações aliados a valores positivos do Laplaciano confirmam a formação de uma ligação de hidrogênio intermolecular entre o Benzeno e o hidrogênio das espécies HX, para todos os compostos estudados. Por exemplo, esses valores para os complexos de hidrogênio da Figura 1 são $\rho(\vec{r})=0,00364 \text{ e/a}_0^3$ e $\nabla^2\rho(\vec{r})=0,01424 \text{ e/a}_0^5$ para benzeno-H₂O e $\rho(\vec{r})=0,00525 \text{ e/a}_0^3$ e $\nabla^2\rho(\vec{r})=0,02103 \text{ e/a}_0^5$ para benzeno-HCN.

Conclusões

Os baixos valores de densidade eletrônica aliados aos valores positivos do laplaciano da densidade eletrônica confirmam a possibilidade de uma ligação de hidrogênio intermolecular entre o Benzeno (receptor de próton do tipo π) e o hidrogênio das espécies HX (doadores de próton), para todos os sistemas estudados, independente de quem seja a espécie X.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio financeiro das Agências de Fomento à Pesquisa: CAPES e CNPq.