

Avaliação da estrutura eletrônica de líquidos iônicos baseados em aminoácidos empregando o método semiempírico PM6: [TYR][HSO₄] vs [PHE][HSO₄]

Jefferson L. Medeiros*¹ (IC), Emmanuel A. S. Borges¹ (IC), Ana Cláudia L. Araújo¹ (IC), Ellen S. S. Cruz¹ (IC), Sidney R. Santana¹ (PQ), Dayse N. Moreira¹ (PQ). jefferson_lemos1989@hotmail.com

¹Laboratório de Química Verde (LQV), Departamento de Ciências Fundamentais e Sociais, Universidade Federal da Paraíba, Campus II, CEP 58397-000, Areia, PB, Brasil.

Palavras Chave: líquidos iônicos, aminoácidos, cálculo semiempírico, PM6.

Introdução

O desenvolvimento de líquidos iônicos (ILs) baseados em aminoácidos (AAILs) é uma importante estratégia para a obtenção de novos líquidos iônicos ambientalmente benéficos. Diversos estudos experimentais tem sido realizados com AAILs, no entanto, estes compostos tem sido pouco explorados em nível teórico quando comparados aos líquidos iônicos baseados no núcleo imidazólico.¹

O *design* de ILs e AAILs ainda utiliza, em muitos casos, o processo de "tentativa-erro", uma vez que as características que controlam as propriedades físico-químicas ainda permanecem pouco compreendidas e, desta forma, o entendimento das forças intermoleculares e da estrutura dos AAILs é crucial para o seu desenvolvimento.

Assim, este trabalho descreve as estruturas e interações intermoleculares dos líquidos iônicos [Tyr][HSO₄] e [Phe][HSO₄] através de cálculo semiempírico PM6.

Resultados e Discussão

A energia livre padrão de interação foi obtida através da diferença entre a energia do par iônico e as energias dos seus fragmentos, segundo a expressão abaixo:

$$\Delta G^\circ = G_{[\text{Cátion}][\text{Anion}]} - G_{\text{cátion}} - G_{\text{ânion}}$$

Os cálculos foram realizados empregando o programa Gaussian 2009.

Várias conformações foram avaliadas seguindo o senso químico e um estudo conformacional foi estabelecido para descrever esta energia total dos conformêros [Tyr][HSO₄] e [Phe][HSO₄].

Os resultados da análise conformacional indicaram a presença de dois conformêros de maior estabilidade energética com a presença de ligações de hidrogênio. O conformêro **1**, mais estável, apresentou três ligações de hidrogênio intermoleculares, enquanto o conformêro **2** apresentou apenas duas, conforme apresentado na **figura 1**.

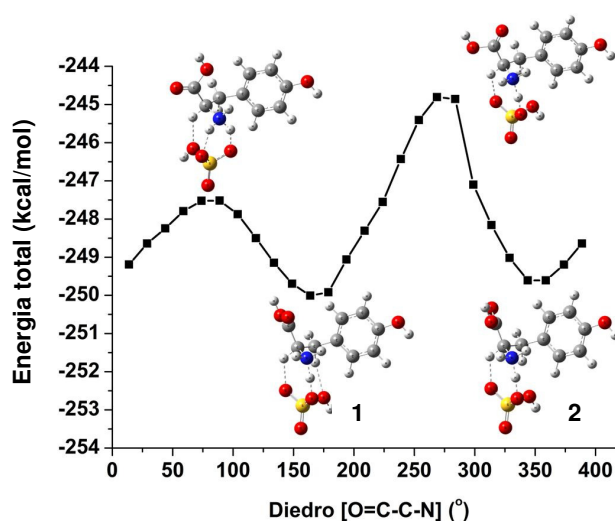


Figura 1. Análise conformacional do líquido iônico [Tyr][HSO₄].

A variação da energia livre para formação dos pares [Tyr][HSO₄] e [Phe][HSO₄] é semelhante, contudo há uma diferença de energia total de aproximadamente 45 kcal/mol entre os conformêros mais estáveis do primeiro líquido iônico em relação ao segundo. O efeito de outras interações presentes nestes conformêros ainda estão sendo avaliadas.

Conclusões

Dados termodinâmicos permitiram avaliar a estabilidade dos conformêros, mostrando que o líquido iônico [Tyr][HSO₄] é mais estável do que o [Phe][HSO₄].

Agradecimentos

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

¹ Gao, H.; Zhang, Y.; Wang, H.-J.; Liu, J.; Chen, J. *J. Phys. Chem. A* **2010**, *114*, 10243.

² Mou, Z.; Li, P.; Bu, Y.; Wang, W.; Shi, J.; Song, R. *J. Phys. Chem. B* **2008**, *112*, 5088.