

Estudo dos efeitos de grupos retiradores ou doadores de elétrons em cálculos de barreiras rotacionais internas de compostos aromáticos.

Naylon B. Gomes¹ (IC), Douglas H. Pereira¹ (PQ), Paulo Vítor B. Leal¹ (PQ), Rogério Custodio(PQ)².

* naylon@uft.edu.br

¹Universidade Federal de Tocantins, Campus Universitário de Gurupi, CP 66, 77402-970, Gurupi - TO, Brasil.

²Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, Barão Geraldo, 13083-970 – Campinas, São Paulo, Brasil

Palavras Chave: Métodos Compostos, Barreiras Rotacionais, Grupos Retiradores ou Doadores de Elétrons.

Introdução

Atualmente estudo teórico de barreiras rotacionais internas vem sendo utilizados para análise de diversas propriedades orgânicas, especialmente em anéis aromáticos com grupos substituintes. Essas moléculas possuem efeitos estereoeletrônicos que são responsáveis por diferentes alturas de barreiras rotacionais^[1].

Alguns cálculos teóricos de alta acuracidade são aplicados nos estudos das atividades que afetam a barreira rotacional e são utilizados com o propósito de atingir uma maior precisão e um menor custo computacional. Estas teorias vêm sendo desenvolvidas com a implementação de pseudopotencial nos métodos compostos^[2-3].

O presente trabalho corresponde ao estudo da torção de grupos doadores ou retiradores de elétrons em anéis aromáticos, esclarecendo os efeitos estereoeletrônicos mais estáveis da torção das moléculas. Inicialmente o estudo foi inicializado com a utilização do funcional de densidade para depois aprimoramento dos resultados com as novas metodologias de métodos compostos desenvolvidos.

Resultados e Discussão

Foram estudadas 12 barreiras rotacionais de moléculas orgânicas aromáticas das quais seis possuem grupo retiradores e seis possuem grupos doadores de elétrons. Os cálculos das barreiras rotacionais foram executados utilizando o método B3LYP/6-311++(2df,p) e o programa utilizado foi o Gaussian 09.

As moléculas estudadas bem como os ângulos de torção estão representadas na figura 1 abaixo.

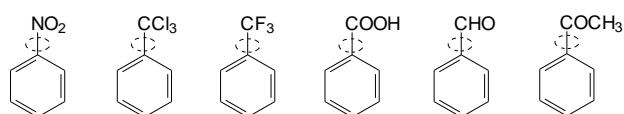
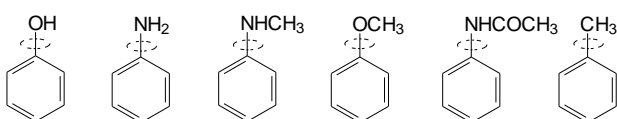


Figura 1. Moléculas estudadas e seus respectivos ângulos de rotação.

Os resultados encontrados com a utilização do método B3LYP/6-311++(2df,p) para as barreiras rotacionais internas dos compostos estudados mostram que quando há grupos retiradores de elétrons as alturas das barreiras rotacionais são bem maiores do que quando há grupos doadores de elétrons. O desvio absoluto médio encontrado para as barreiras rotacionais é de $0,5 \text{ kcal mol}^{-1}$, o que indica a grande precisão da metodologia utilizada.

Além do método utilizado as novas versões de métodos compostos adaptados a pseudopotencial, teoria G3CEP e G3(MP2)//B3-CEP^[2-3] será utilizada para uma melhor descrição das alturas das barreiras rotacionais bem como para um melhor entendimento dos principais feitos de função de bases para cada barreira rotacional.

Conclusões

Os resultados encontrados mostram que as alturas das barreiras rotacionais para os compostos aromáticos que possuem grupos retirados de elétrons são maiores que para os compostos com grupos doadores de elétrons. O DAM encontrado para os cálculos das barreiras rotacionais são menores que $0,5 \text{ kcal mol}^{-1}$ indicando assim uma alta precisão do método empregado.

Agradecimentos

Agradecemos o apoio financeiro da UFT, FAPESP, CNPq, CAPES e FAEPEX-UNICAMP.

¹ Ducati, L. C.; Custodio, R.; Rittner, R. *International Journal of Quantum Chemistry* **2010**, *110*, 206.

²Pereira, D. H.; Ramos, A. F.; Morgon, N. H.; Custodio, R. *The Journal of chemical physics* **2011**, *135*, 034106.

³Pereira, D. H.; Ramos, A. F.; Morgon, N. H.; Custodio, R. *The Journal of chemical physics* **2011**, *135*, 21990.