



XXIX CONGRESSO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA (CIC)
2019
UACSA, UAST, UFAPE, CODAI e UEADTEC
Universidade Federal Rural de Pernambuco
Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação
Coordenação de Programas Especiais



AVANÇOS NO ESTUDO TEÓRICO DA INFLUÊNCIA DO TAUTOMERISMO CETO-ENÓLICO NA ESPECTROSCOPIA DE ABSORÇÃO UV-VISÍVEL DE BETADICETONAS

Alex Sandro Nascimento da Silva Filho¹, Hécio José Batista¹, Vitocley Bezerra de Moraes³,
E-mail: alex-ssilva1@hotmail.com

¹ Laboratório de química teórica, Departamento de química, Universidade Federal Rural de Pernambuco

As betadicetonas são compostos que possuem em sua estrutura duas carbonilas separadas por uma unidade de carbono, com aplicabilidade em filtros solares, materiais eletroluminescentes e catalisadores. Têm facilidade de complexação com íons, e no caso de lantanídeos, apresentam o efeito antena, favorecendo a luminescência. Este estudo computacional visa analisar como o tautomerismo ceto-enol influencia na absorção eletrônica molecular desses compostos. Um estudo espectroscópico Uv-vis de uma série de betadicetonas [R1COCH2COR2 onde R1,R2=CH3,CF3, fenila] foi feito no vácuo, após análise conformacional de seis diferentes rotâmeros referentes ao ângulo diedro entre as carbonilas - do *cis* ao *trans*, e em vários solventes (método contínuo SMD) pelos métodos INDO-S, CISd e TD-DFT (bases 3-21G, 6-31G, 6-31++G, 6-31g** e 6-31+G*). Os resultados, comparados com dados experimentais, indicam o TDDFT como melhor método e base 6-31+G*. Apenas os rotâmeros *cis* e *trans* (maior e menor polaridade) dos tautômeros ceto e enol tiveram seus espectros calculados. A forma enólica é favorecida na forma gasosa e em solventes apolares, mas os resultados ainda não são conclusivos, provavelmente porque o método de solvatação utilizado não contempla interações específicas. Ainda, foi estudado o perfil da reação (Estado de transição e IRC) de transferência de próton (TP) no equilíbrio ceto-enol bem como na transferência de próton entre as duas carbonilas vizinhas na forma enólica, para investigar as barreiras energéticas e estimar constantes de equilíbrio, a partir da caracterização de estados reagente e produto mais prováveis. Os resultados são bastante preliminares, no que ainda não se tem uma correta avaliação da proporção ceto-enólica para todas as espécies. Estudos similares avançam em meio solvente. No entanto, curioso foi notar que estruturas de não equilíbrio do perfil de reação TP, em geral, produzem bandas espectrais mais em concordância com os experimentais que estruturas de equilíbrio, em especial próximas ao estado de transição, a qual se assemelha mais à estrutura eletrônica das betadicetonas quando coordenadas a cátions metálicos, as quais apresentam as bandas mais intensas de menor energia (low-lying states) semelhantes às dos ligantes não complexados, fato não explicado devidamente na literatura.

Palavras-chave: betadicetonas, tautomerismo, Uv-vis

Área do Conhecimento: Ciências Exatas e da Terra.

Realização:



Apoio:



FUNDAÇÃO APOLÔNIO SALLES
F A D U R P E