

Química

Análise conformacional do 2-amino-1-propanol, de seu éter metílico e seu complexo com Zn²⁺

Lauane Cristina Mendonça - 8º módulo de Química Bacharelado, UFLA, bolsista PIBIC/CNPq.

Matheus Puggina de Freitas - Orientador DQI, UFLA. - Orientador(a)

Resumo

Aminoálcoois apresentam ligação de hidrogênio intramolecular, em que o nitrogênio atua como melhor acceptor de prótons do que o oxigênio, podendo competir com a complexação de metais em processos de remoção do solo e da água. Neste trabalho, foram exploradas as propriedades conformacionais do 2-amino-1-propanol e de seu éter metílico, em estado livre e complexados com Zn²⁺, por meio de cálculos B3LYP-GD3BJ/6-311++G(d,p) implementados no programa Gaussian 16. Para o aminoálcool, a conformação G7 foi identificada como o mínimo de energia global, caracterizada pela orientação da ligação O–H em direção ao nitrogênio e pela formação de uma ligação de hidrogênio intramolecular O–H...N, confirmada como principal fator estabilizante. Já a orientação da ligação N–H em direção ao oxigênio não correspondeu ao mínimo de energia global, evidenciando que a interação O–H...N é mais estabilizante que a N–H...O. Para o éter metílico, a conformação G6 mostrou-se mais estável, regida por efeito gauche de origem orbitalar, do tipo SigmaCH-Sigma*CO e SigmaCH-Sigma*CN. A conformação G2 (que direciona o grupo O-Me para o nitrogênio), análoga à G7 do aminoálcool, foi cerca de 3 kcal·mol⁻¹ menos estável que a G6, confirmando a ligação de hidrogênio como fator governante no aminoálcool. Nos complexos com Zn²⁺, verificou-se um arranjo bidentado, com coordenação simultânea do oxigênio e do nitrogênio ao metal, rompendo a ligação intramolecular O–H...N e se sobrepondo a ela. Esses resultados demonstram que, no 2-amino-1-propanol, a ligação de hidrogênio O–H...N determina o equilíbrio conformacional, enquanto no éter metílico predomina o efeito gauche, e que a complexação bidentada com Zn²⁺ reforça o potencial do fragmento O–C–C–N como unidade favorável em agentes de remediação de metais pesados.

Palavras-Chave: Química Computacional, Química Organica, Aminoalcoois.

Instituição de Fomento: CNPq

Link do pitch: <https://youtu.be/D8QFr4XzM4>