ANÁLISE DO MECANISMO S_N2 DE DERIVADOS DO CIANETO DE ISOPROPILA: MOLÉCULA ENCONTRADA EM SAGITTARIUS B2

Jéssica Cristina Baldi dos Santos (IC) e Prof. Dr. Nelson Henrique Morgon (Orientador), Instituto de Química - UNICAMP.

Resumo

O cianeto de isopropila foi a primeira molécula orgânica ramificada a ser encontrada no meio interestelar. Nesse estudo teórico, foram realizados cálculos de estabilidade em reações de formação via S_N2 do cianeto de isopropila e também do isocianeto de isopropila a partir de halogenetos de isopropila ($x = F, Cl$ e Br). A partir dos resultados determinou-se qual dos seus correspondentes halogenetos são mais propensos a sofrerem reações de S_N2 e originarem moléculas de isocianeto e cianeto de isopropila.

Palavras Chave: Isopropila, Mecanismo S_N2 , B3LYP

Introdução

Atualmente o homem conhece muitas moléculas presentes no meio interestelar, principalmente moléculas orgânicas e de estrutura linear. Várias pesquisas buscam por moléculas orgânicas ramificadas, semelhantes estruturalmente aos aminoácidos, uma parte importante das células que poderia auxiliar no surgimento de formas de vida. A primeira molécula orgânica ramificada foi encontrada em 2014 na nuvem de gás *Sagittarius B2*, o cianeto de isopropila¹. Assim surgiu o interesse em estudar possíveis reações de formação para ela. O objetivo desse trabalho é estudar as estruturas eletrônicas e moleculares de derivados de halogenetos de isopropila ($X = F, Cl$ e Br), verificando-se o comportamento dos grupos de saída no mecanismo S_N2 .

Resultados e Discussão

Foram efetuados cálculos teóricos da estrutura eletrônica e molecular das espécies envolvidas no mecanismo tipo S_N2 . Otimizou-se as geometrias moleculares e fez-se análises vibracionais para caracterizar os pontos estacionários (mínimos e estado de transição). Foi utilizado o método B3LYP com bases de Pople 6-31G(2d,p). Na Fig. 1 observa-se o perfil do progresso de reação entre o fluoreto e o cianeto de isopropila. A barreira de conversão entre reagente e produto corresponde a aproximadamente 140 kJ/mol. Os cálculos teóricos foram feitos com o programa GAMESS versão 2013². Estudos neste nível de teoria indicam que os compostos fluoreto e cianeto de isopropila possuem praticamente a

mesma energia, no entanto cálculos mais refinados serão feitos para melhor avaliação.

Figura 1. Mecanismo S_N2 para o F-Isopropila

Conclusões

Com base no estudo teórico no nível B3LYP/6-31G(2d,p) observa-se uma barreira de aproximadamente 140 kJ/mol relacionada ao mecanismo S_N2 para a reação: $CH_3CH(F)CH_3 + CN^-$. Cálculos para analisar o efeito de diferentes substituintes halogenetos e também da reação de interconversão entre o cianeto e o correspondente isômero isocianeto de isopropila estão em progresso.

Agradecimentos

Agradecemos ao Instituto de Química pela infraestrutura computacional e Jéssica C.B. Santos agradece ao SAE pela bolsa concedida.

¹Belloche, A.; Garrod, R. T.; Müller, H. S. P.; Menten, K. M.; *Science Journal*, **2014**, 345, 1584-1587.

²<http://www.msg.ameslab.gov/games/>