
UM ESTUDO TEÓRICO DA PRESENÇA DE INTERAÇÕES INTERMOLECULARES EM ESTRUTURAS INTERMEDIÁRIAS DO MECANISMO S_N2 ENTRE 3-CLORO-1-PROPENO E FLUORETO DE SÓDIO: F...H, Cl...Na E Cl...C?

Luiz Fernando B. Araújo^a, Mauro A. Bueno^a e Boaz G. Oliveira^{a,*}

^aPrograma de Pós-Graduação em Química Pura e Aplicada, Centro das Ciências Exatas e das Tecnologias, Universidade Federal do Oeste da Bahia, 47810-059 Barreiras – BA, Brasil

Recebido: 28/10/2025; aceito: 26/01/2026; publicado online: 24/02/2026

*e-mail: boazgaldino@gmail.com

ORCID:

Boaz G. Oliveira: <https://orcid.org/0000-0001-9963-5791>

Tabela 1S. Valores das distâncias de ligação dos monômeros NaF e C₃H₅Cl obtidas pelo nível de cálculo B3PW91/aug-cc-pVTZ

Ligações e interações	Sistemas	
	NaF	C ₃ H ₅ Cl
$r_{(\text{Na}^{\text{e}}-\text{F}^{\text{d}})} / \text{\AA}$	1.9478	–
$r_{(\text{Ca}=\text{C}^{\text{b}})} / \text{\AA}$	–	1.3260
$r_{(\text{Cb}-\text{C}^{\text{c}})} / \text{\AA}$	–	1.4838
$r_{(\text{Ca}-\text{H}^1)} / \text{\AA}$	–	1.0845
$r_{(\text{CC}-\text{C}^2)} / \text{\AA}$	–	1.0874
$r_{(\text{CC}-\text{Cl})} / \text{\AA}$	–	1.8114
$r_{(\text{Cb}-\text{H}^3)} / \text{\AA}$	–	1.0854

Tabela 2S. Valores das frequências de estiramento e intensidades de absorção dos monômeros NaF e C₃H₅Cl bem como dos complexos I, II e III obtidas pelo nível de cálculo B3PW91/aug-cc-pVTZ

Modos	Sistemas				
	NaF	C ₃ H ₅ Cl	I	II	III
$\nu_{(\text{Na}^{\text{e}}-\text{F}^{\text{d}})}$	521,3 (66,20) [550,00] ^a	– (–)	463,14 (40,20)	– (–)	461,66 (11,72)
$\nu_{(\text{C}^{\text{a}}=\text{C}^{\text{b}})}$	– (–)	1.710,27 (2,72) [1,642,70] ^b	1.689,81 (0,24)	1.702,88 (1,92)	1.679,51 (5,88)
$\nu_{(\text{C}^{\text{b}}-\text{C}^{\text{c}})}$	– (–)	955,20 (5,71) [937,00] ^b	968,72 (12,47)	958,70 (12,87)	975,68 (23,23)
$\nu_{(\text{C}^{\text{c}}-\text{Cl})}$	– (–)	751,46 (54,93) [739,00] ^b	557,78 (55,03)	571,48 (49,49)	492,45 (137,57)
$\nu_{(\text{C}^{\text{a}}-\text{H}^1)}$	– (–)	3.139,30 (2,38) [2.950,00] ^b	3.101,55 (34,61)	3.126,46 (10,33)	3.109,71 (15,19)
$\nu_{(\text{C}^{\text{c}}-\text{H}^2)}$	– (–)	3.082,51 (11,14) [2.950,00] ^b	3.021,20 (99,78)	3.164,04 (0,28)	2.981,27 (146,19)
$\nu_{(\text{C}^{\text{b}}-\text{H}^3)}$	– (–)	3.164,05 (4,23) [3.092,00] ^b	3.156,10 (3,53)	2.975,14 (274,30)	3.036,74 (175,85)
$\nu_{(\text{Na}^{\text{g}}-\text{F}^{\text{f}})}$	– (–)	– (–)	– (–)	474,26 (46,60)	478,81 (27,81)

Intensidades de absorção e dados experimentais são dados dentre parênteses e colchetes, respectivamente. Valores de ν e I dados em cm⁻¹ e km mol⁻¹, respectivamente. Valores experimentais: ^aDurig *et al.*,¹ ^bSnelson e Pitzer.²

Tabela 3S. Valores das densidades eletrônicas e Laplacianos (dentre colchetes) QTAIM para os monômeros NaF e C₃H₅Cl

BCPs	$\rho [\nabla^2\rho] / (e a_0^{-3}) [e a_0^{-5}]$	
	NaF	C ₃ H ₅ Cl
(Na ^e -F ^d)	0,0513 [0,4337]	–
(C ^a =C ^b)	– [–]	0,3597 [–1,2778]
(C ^b -C ^c)	– [–]	0,2715 [–0,7667]
(C ^a -H ¹)	– [–]	0,2884 [–1,1294]
(C ^c -H ²)	– [–]	0,2938 [–1,1603]
(Cl ^e ...C ^c)	– [–]	0,1724 [–0,1981]
(C ^b -H ³)	– [–]	0,2913 [–1,1451]

Tabela 4S. Valores das elipticidades (ϵ) QTAIM para as ligações π e σ do cloreto de alila

Sistemas	Elipticidade (ϵ)	
	(C ^a =C ^b)	(C ^b -C ^c)
C ₃ H ₅ Cl	0,3292	0,0289
I	0,3086 [–0,020]	0,0286 [–0,0003]
II	0,3099 [–0,019]	0,0192 [–0,097]
III	0,2905 [–0,039]	0,0276 [–0,001]

Tabela 5S. Coordenadas cartesianas das geometrias otimizadas dos monômeros NaF e C₃H₅Cl coletadas dos cálculos B3PW91/aug-cc-pVTZ

Monômeros							
NaF				C ₃ H ₅ Cl			
Na	0,000000	0,000000	0,876516	C	-2,216647	-0,192800	-0,307939
F	0,000000	0,000000	-1,071298	H	-3,054344	-0,824329	-0,040563
				H	-2,310193	0,389847	-1,217871
				C	-1,126931	-0,132963	0,445345
				H	-1,049772	-0,733264	1,346412
				C	0,033360	0,739863	0,139328
				H	0,267636	1,412046	0,963349
				H	-0,119054	1,317795	-0,769113
				Cl	1,536884	-0,238041	-0,114272
E = -262,1520954 Hartree				E = -577,4861274 Hartree			
ZPE = 3,1184 kJ mol ⁻¹				ZPE = 187,3889 kJ mol ⁻¹			
μ = 8,2118 Debye				μ = 2,0423 Debye			

Tabela 6S. Coordenadas cartesianas das geometrias otimizadas dos complexos I, II e III coletadas dos cálculos B3PW91/aug-cc-pVTZ

Complexos				
I				
C	1,534843	-1,676889	-0,517635	
H	2,201006	-2,228806	-1,170497	
H	0,622071	-2,153334	-0,165582	
C	1,816027	-0,430938	-0,147938	
H	2,709175	0,076854	-0,499483	
C	0,933905	0,298301	0,788264	
H	1,463919	0,795505	1,596634	
H	0,114725	-0,336402	1,138592	
Cl	0,093877	1,720704	-0,081816	
F	-1,402600	-1,573181	0,609192	
Na	-1,981096	-0,035454	-0,520696	
E = -839,6604469 Hartree				
ZPE = 193,8176 kJ mol ⁻¹				
μ = 4,8466 Debye				
II				
C	2,132099	1,508032	-0,522538	
H	2,031428	2,504973	-0,933781	
H	3,102863	1,031440	-0,621293	
C	1,112142	0,916161	0,089128	
H	0,129407	1,395844	0,194472	
C	1,259904	-0,416787	0,714132	
H	0,898895	-0,442379	1,739557	
H	2,267295	-0,820699	0,651928	
Na	-2,101264	-0,168473	-0,337580	
F	-1,768008	1,654134	0,368667	
Cl	0,210071	-1,691036	-0,136462	
E = -839,6570394 Hartree				
ZPE = 192,9890 kJ mol ⁻¹				
μ = 5,3229 Debye				
III				
C	0,548189	2,299930	-0,502604	
H	0,188857	3,107001	-1,130721	
H	1,618092	2,206093	-0,332557	
C	-0,307388	1,454396	0,073095	
H	-1,391975	1,507574	-0,064558	
C	0,217647	0,439571	0,996658	
H	-0,347016	0,323680	1,917047	
H	1,306626	0,472997	1,123857	
Cl	-0,020835	-1,337349	0,237337	
F	3,100948	0,501619	0,407176	
Na	2,574444	-0,994176	-0,790411	
Na	-2,749491	-1,032663	-0,247184	
F	-3,306010	0,859428	-0,133527	
E = -1.101,8255773 Hartree				
ZPE = 198,4003 kJ mol ⁻¹				
μ = 10,3962 Debye				

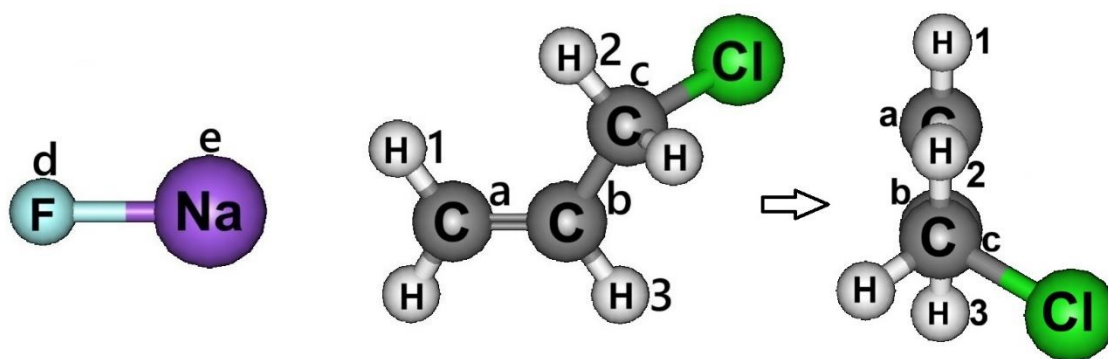


Figura 1S. Estruturas dos monômeros NaF e C₃H₅Cl na forma gauche mais estável³

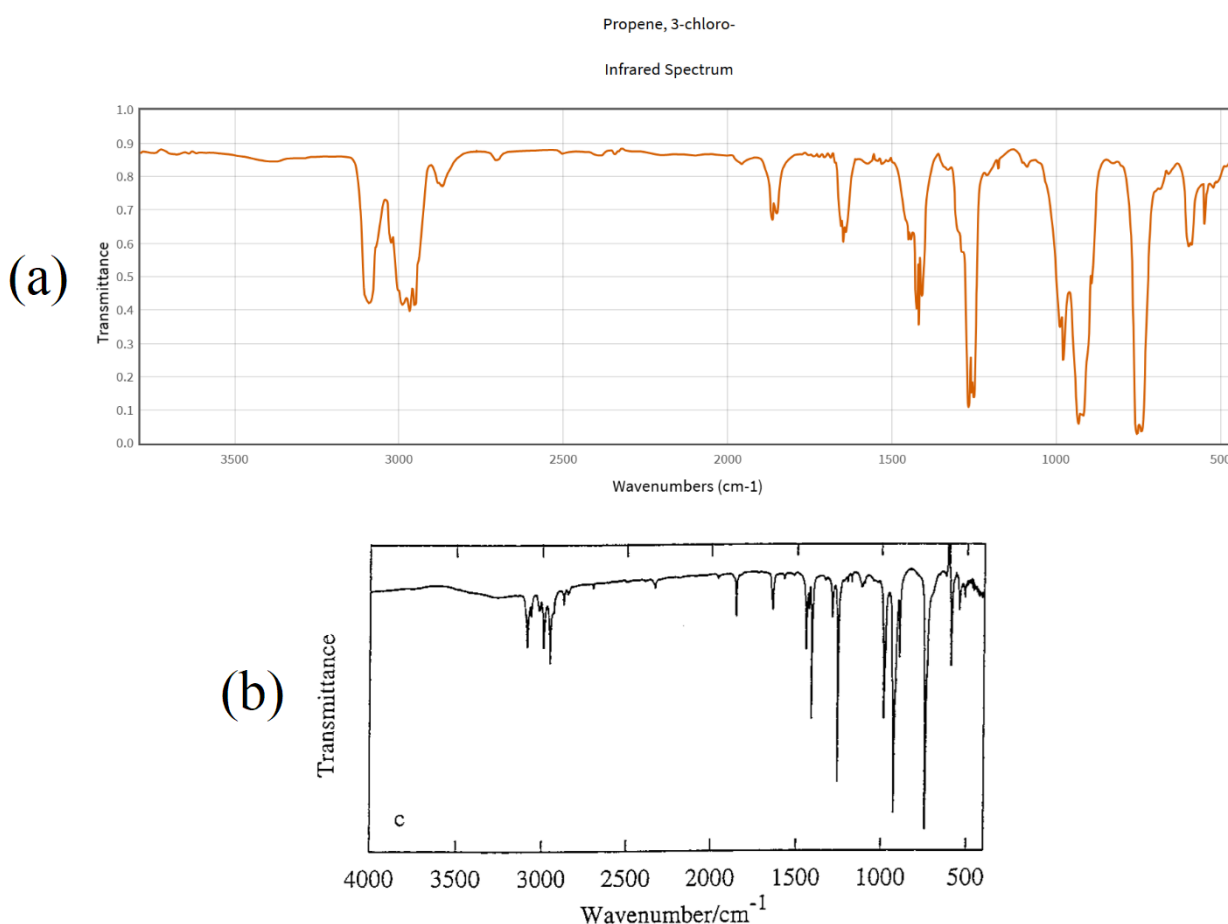


Figura 2S. Espectro experimentais na região para o cloreto de alina: (a) referência 4 e (b) referência 1.

Referências

1. Durig, J. R.; Durig, D. T.; van der Veken, B. J.; Herrebout, W. A.; *J. Phys. Chem. A* **1999**, 103, 6142. [[Crossref](#)]
2. Snelson, A.; Pitzer, K. S.; *J. Phys. Chem.* **1963**, 67, 882. [[Crossref](#)]
3. McLachlan, R. D.; Nyquist, R. A.; *Spectrochim. Acta, Part A* **1968**, 24, 103. [[Crossref](#)]
4. National Institute of Standards and Technology (NIST); *Allyl Chloride Infrared Spectrum*, [[Link](#)] acessado em janeiro 2026

