

METODOLOGIA AGOA: A MODELAGEM DE CLUSTERS DE HIDRATAÇÃO NO COMPLEXO AZIRIDINA...ÁCIDO FLUORÍDRICO
Boaz G. Oliveira*, Regiane C. M. U. Araújo e Antônio B. Carvalho

Departamento de Química, Universidade Federal da Paraíba, 58059-900 João Pessoa – PB, Brasil

Mozart N. Ramos

Departamento de Química Fundamental, Universidade Federal de Pernambuco, 50739-901 Recife - PE, Brasil

Como informação suporte para este trabalho, estamos dispondo para apreciação as configurações dos *clusters* de hidratação (coordenadas cartesianas) do complexo $C_2H_5N...HF$ obtidos pela metodologia AGOA e, também, a geometria do complexo $C_2H_5N...HF$ obtida a partir do nível de cálculo B3LYP/6-311++G(d,p).

1-) Coordenadas Cartesianas dos *clusters* de hidratação no complexo $C_2H_5N...HF$ obtidos pela metodologia AGOA.

N	0.998869	-0.166776	-0.177180	H	3.617252	0.357206	-0.809931	H	-1.124427	-0.043687	2.173957
C	1.555823	-0.513608	-1.499017	H	3.840574	1.157613	0.455188	O	-0.714755	2.185643	0.607997
C	1.537322	-1.520773	-0.410639	O	2.853055	1.774914	0.288564	H	-0.966057	1.862246	-0.257195
H	2.505269	-0.069284	-1.775616	H	3.757102	2.024759	0.477497	H	-1.521513	2.148845	1.121886
H	0.820430	-0.569065	-2.292497	H	2.841644	0.822918	0.386560	O	-4.352068	-0.402389	0.876407
H	2.473879	-1.778136	0.071030	O	4.115910	-1.582930	-0.072099	H	-3.554645	-0.328186	0.352282
H	0.788568	-2.303589	-0.418110	H	4.922033	-1.347798	0.387831	H	-4.091430	-0.116399	1.751836
H	1.635072	0.408025	0.365544	H	4.202877	-2.520059	-0.244952	O	-4.327117	0.955891	-0.591398
H	-0.604140	0.031257	-0.021173	O	4.140861	-0.224650	-1.539905	H	-4.117573	1.714824	-0.046999
F	-1.567949	0.098994	0.025126	H	5.075934	-0.023697	-1.567373	H	-3.478601	0.557152	-0.784494
O	3.269848	0.429253	0.412977	H	4.097884	-1.127938	-1.225688	O	-3.032184	-1.440613	1.300669
H	3.800202	-0.112889	-0.171261	O	3.674166	-1.595549	1.271293	H	-2.202429	-1.512307	0.828756
H	3.632346	0.268910	1.283838	H	4.393594	-1.887381	0.711382	H	-2.803878	-1.008725	2.123886
O	2.840579	1.095774	1.022467	H	3.848079	-2.006453	2.118283	O	-2.982283	1.275947	-1.634941
H	3.762608	1.192458	0.783014	O	3.724068	1.121011	-1.664318	H	-2.617424	2.159326	-1.685916
H	2.811640	0.297093	1.548998	H	4.414059	0.786995	-2.237058	H	-2.289080	0.752763	-1.232664
O	3.699117	-0.237269	-0.196512	H	3.926706	0.752469	-0.804209	O	-3.865771	1.250710	1.051843
H	4.169677	-0.847845	-0.763612	O	4.128386	-0.903790	-0.806002	H	-3.622084	2.113726	1.386695
H	4.121194	-0.328843	0.657516	H	4.980811	-0.974078	-1.236579	H	-3.051397	0.747888	1.068294
O	3.686642	-0.916409	0.537390	H	4.169258	-1.536172	-0.088285	O	-4.813414	-0.697209	-0.766834
H	4.208677	-1.468420	-0.045358	O	-3.493530	-1.735432	-0.342572	H	-4.397371	0.148466	-0.933310
H	4.057910	-1.066727	1.406912	H	-2.798828	-1.350158	-0.876264	H	-4.171397	-1.182690	-0.249054
O	3.711592	0.441871	-0.930415	H	-3.130171	-1.760512	0.542423	O	-3.461453	-0.774092	1.910159
H	4.573337	0.390465	-1.344723	O	-3.468580	-0.377152	-1.810377	H	-3.182622	0.120134	2.107164
H	3.743151	-0.209052	-0.229334	H	-3.145509	0.521935	-1.751600	H	-2.682222	-1.308123	2.064456
O	1.508220	1.454857	1.332108	H	-2.733590	-0.916045	-1.517851	O	-3.411551	1.942469	-1.025452
H	2.220512	1.153048	0.768566	O	-4.339593	0.276751	0.142505	H	-3.129161	2.838221	-0.840735
H	1.689016	1.054670	2.182727	H	-3.939459	1.136022	0.010004	H	-2.635881	1.406910	-0.858866
O	3.257373	-0.249888	1.146880	H	-3.681666	-0.222327	0.626308	O	-4.384146	-1.363730	-1.376323
H	4.173284	-0.007349	1.284560	O	-0.739706	0.827362	2.075802	H	-4.178596	-0.644416	-0.779270
H	3.234758	-1.195164	1.296413	H	-1.413047	1.338150	1.626418	H	-3.531634	-1.722850	-1.622074
O	3.282323	1.108393	-0.320926								

2-) Geometria do complexo $C_2H_5N \cdots HF$ obtida a partir do nível de cálculo B3LYP/6-311++G(d,p).

N	-0.588916	0.217857	0.000000
C	-0.588916	-1.058048	0.741494
C	-0.588916	-1.058048	-0.741494
H	-1.500018	-1.337979	1.258063
H	0.330212	-1.262889	1.277030
H	-1.500018	-1.337979	-1.258063
H	0.330212	-1.262889	-1.277030
H	-1.502923	0.658712	0.000000
H	0.751106	1.133085	0.000000
F	1.586760	1.620168	0.000000