

MATERIAL SUPLEMENTAR

Estudo teórico de potenciais agentes para o tratamento da doença de Alzheimer derivados da 8-hidroxiquinolina com substituintes do tipo *N*-acil-hidrazona

Talis U. da Silva^a, Leonardo Viana de Freitas^b, Nicolás A. Rey^c e Sérgio de Paula Machado^{a,*}

^aDepartamento de Química Inorgânica, Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 21945-970 Rio de Janeiro – RJ, Brasil

^bInstituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro, 26530-060 Nilópolis – RJ, Brasil

^c Departamento de Química, Centro Técnico Científico, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 22453-900 Rio de Janeiro – RJ, Brasil

*e-mail: sergiopm.iq.ufrj.br

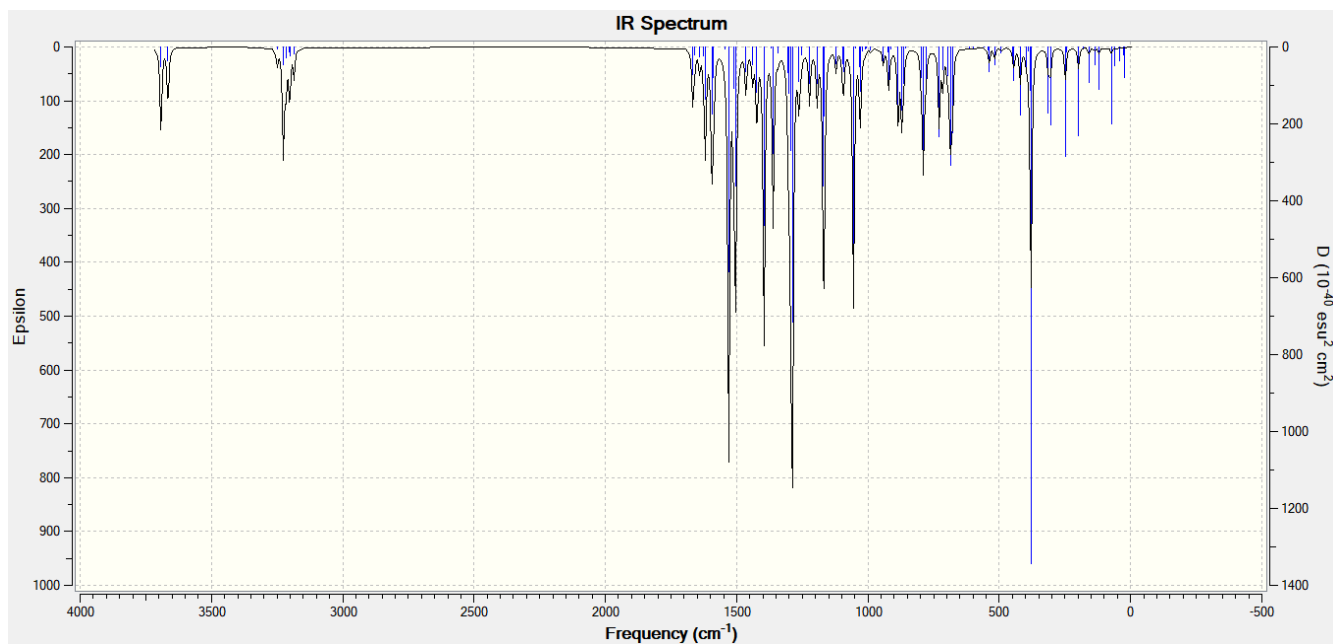


Figura 1S. A Espectro teórico calculado neste trabalho para o ligante INHHQ. O espectro foi obtido em fase gasosa

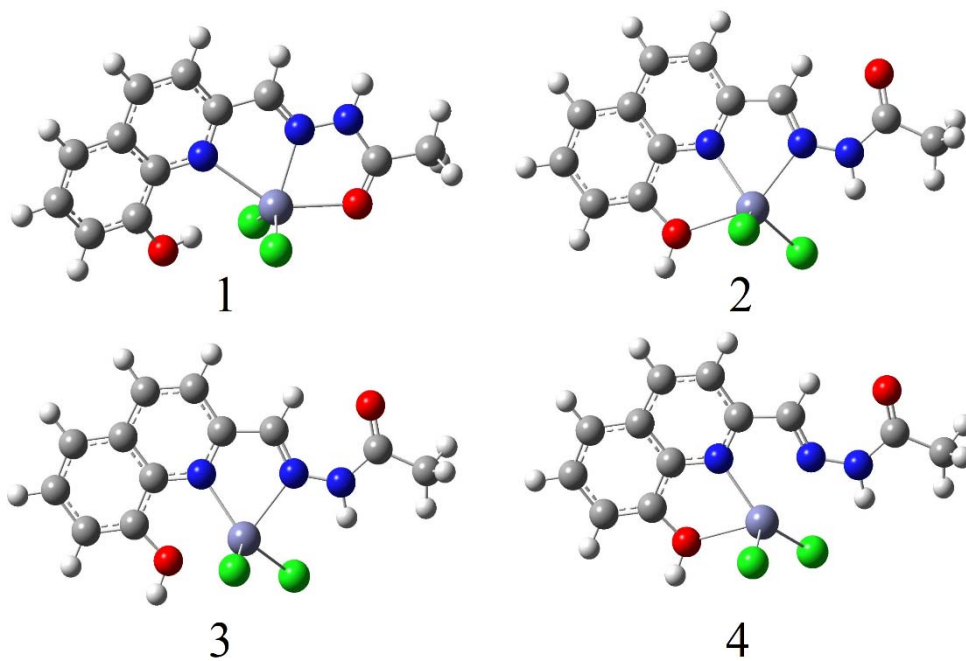


Figura 2S. Estruturas otimizadas dos quatro isômeros do complexo [Zn(8-H₂QH)Cl₂]

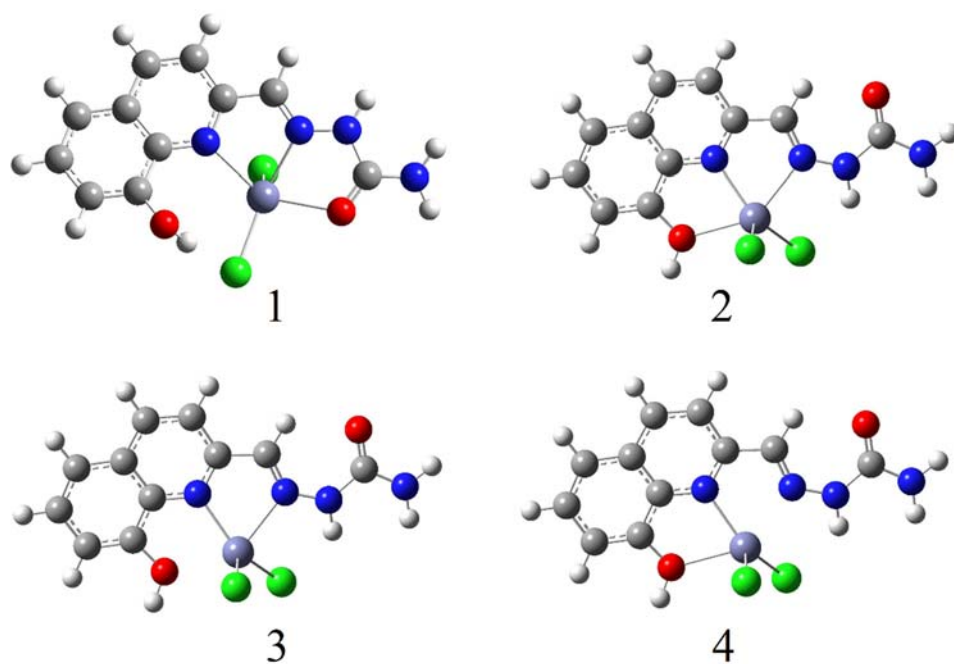


Figura 3S. Estruturas otimizadas dos quatro isômeros do complexo [Zn(8-H₂QS)Cl₂]

Tabela 1S. Principais distâncias de ligação dos isômeros do complexo [Zn(8-H₂QH)Cl₂]

Distância de ligação (Å)	1	2
C ₁ =O ₂	1,255	1,256
O ₁ -H	1,000	0,9773
C ₂ =N ₂	1,297	1,307
C ₃ =N ₃	1,352	1,344
O ₁ -C ₈	1,363	1,397
O ₁ -Zn	3,353	2,342
O ₂ -Zn	2,281	5,131
N ₂ -Zn	2,167	2,274
N ₃ -Zn	2,458	2,132

Tabela 2S. Principais distâncias de ligação dos isômeros do complexo $[Zn(8-H_2QS)Cl_2]$

Distância de ligação (Å)	1	2
C1=O2	1,259	1,257
O1-H	1,004	0,9772
C2=N2	1,293	1,307
C3=N3	1,351	1,345
O1-C8	1,377	1,398
O1-Zn	3,643	2,341
O2-Zn	2,316	5,139
N2-Zn	2,226	2,275
N3-Zn	2,436	2,127

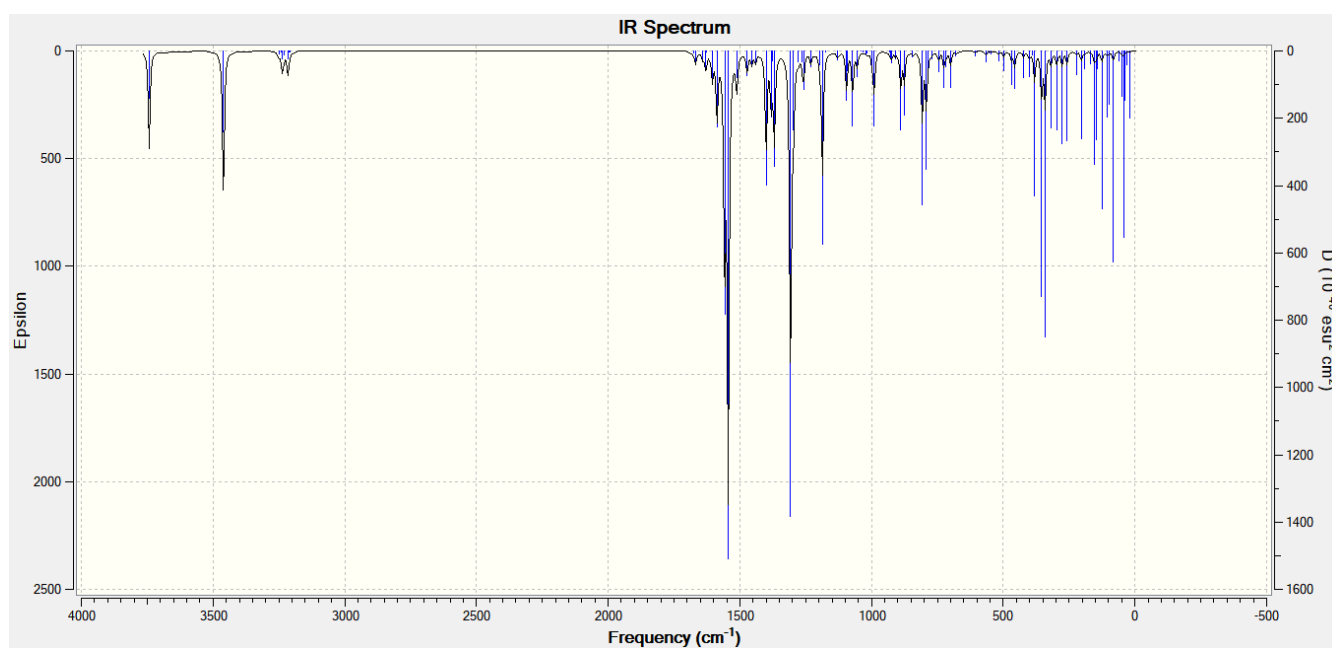


Figura 4S. A Espectro teórico calculado neste trabalho para o isômero 1 do complexo $[Zn(INHHQ)Cl_2]$. O espectro foi obtido em fase gasosa

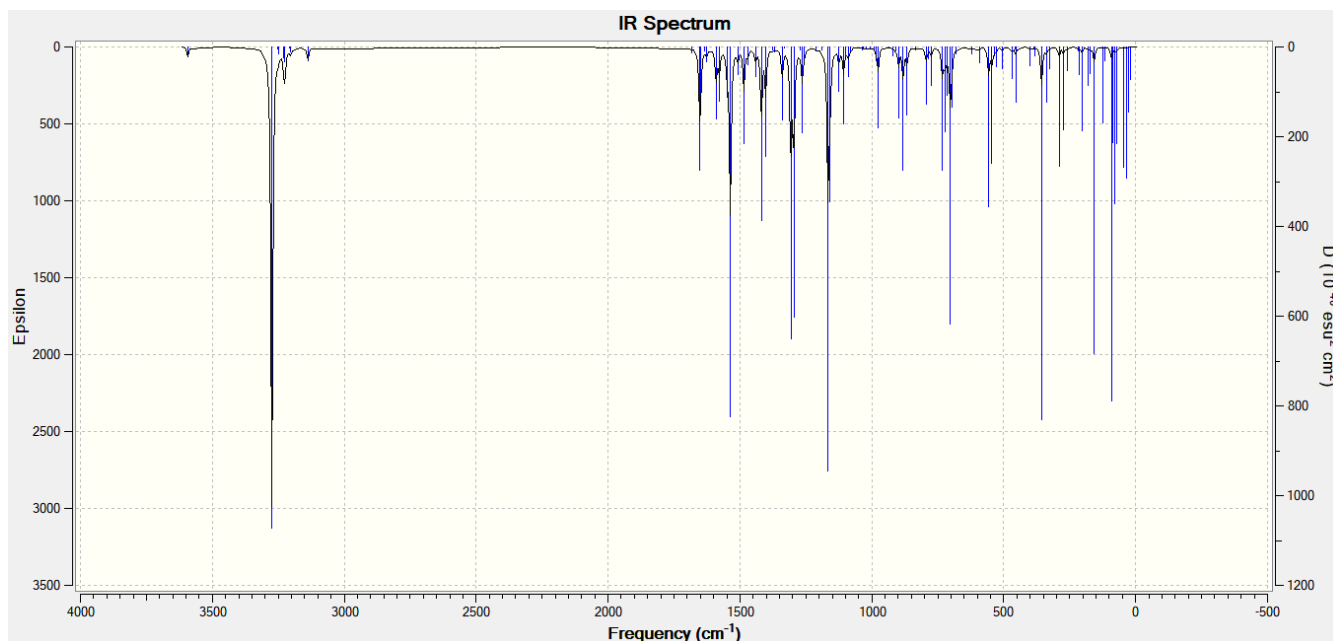


Figura 5S. A Espectro teórico calculado neste trabalho para o isômero 2 do complexo $[Zn(INHHQ)Cl_2]$. O espectro foi obtido em fase gasosa

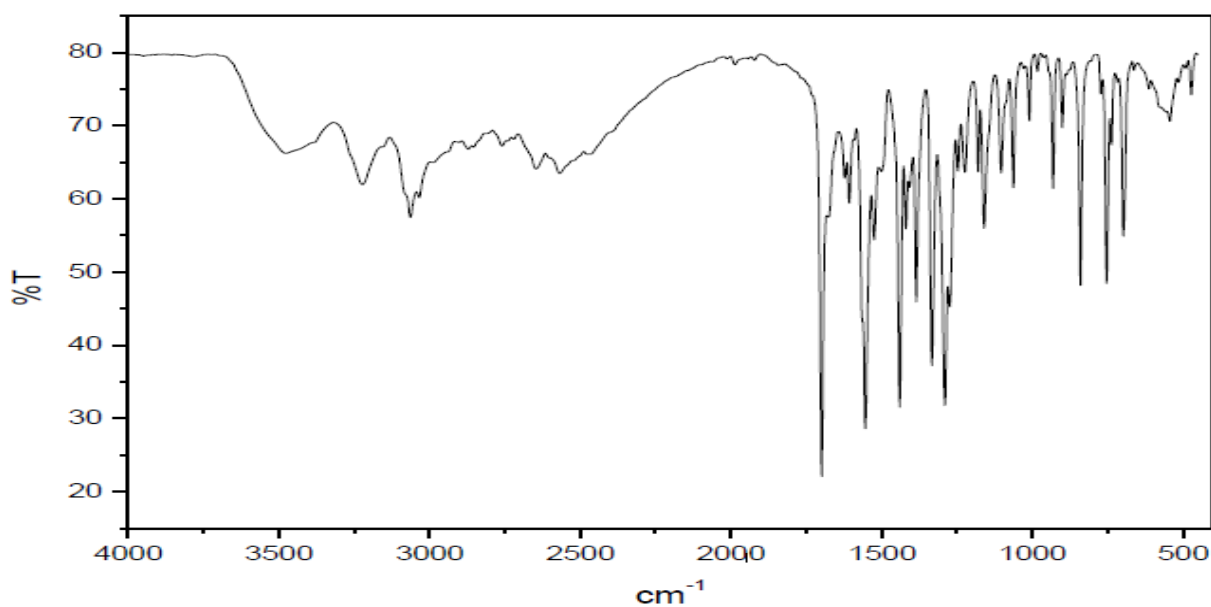


Figura 6S. A Espectro experimental do complexo $[Zn(INHHQ)Cl_2]$.¹ O espectro foi obtido em pastilha de KBr

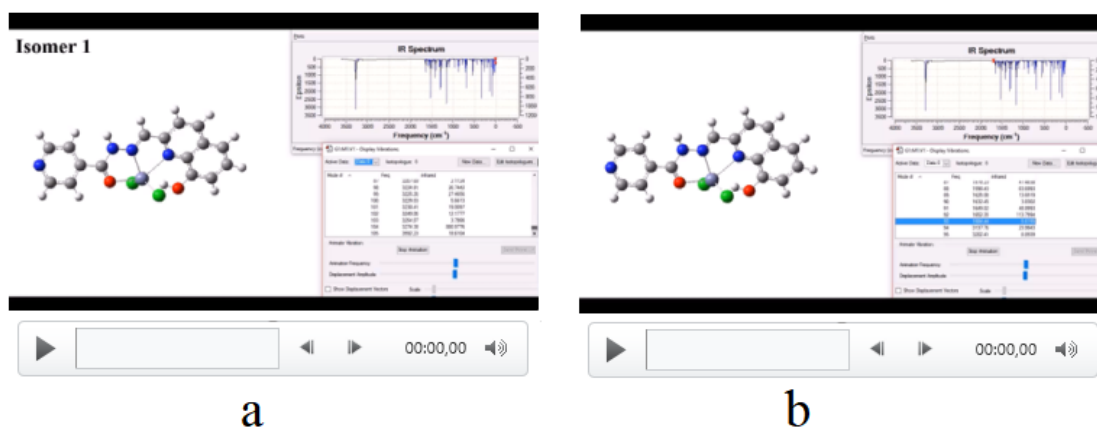


Figura 7S. Animações obtidas por meio da ferramenta GaussView para o INHHQ e os isômeros do $[Zn(INHHQ)Cl_2]$: modos vibracionais das ligações O_1-H e N_1-H , disponíveis no link <https://www.dropbox.com/s/qhcrme1mcflxhck/Sup%20-%20Link%20na%20Figura%208S%20-%20Anima%C3%A7ao%20A.mp4?dl=0> (a) e modos vibracionais das ligações $C_2=O_2$ e $C_3=N_3$, disponíveis no link <https://www.dropbox.com/s/7pbnhxnodb6st4/Sup%20-%20Link%20na%20Figura%208S%20-%20Anima%C3%A7%C3%A3o%20B.mp4?dl=0> (b)



This is an open-access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License.