

ESTUDO DO EFEITO SOLVENTE SOBRE AS PROPRIEDADES ÓPTICAS LINEARES DE UM DERIVADO DE CHALCONA (APOIO UNIP)

Aluna: Jhenyfer Carneiro de Castro

Orientador: Prof. Dr. Clodoaldo Valverde

Curso: Engenharia Civil

Campus: Goiânia Flamboyant

Os derivados de chalcona vêm ganhando maior visibilidade de pesquisadores nos últimos anos e a razão para tal reconhecimento é dada pela sua aplicação na óptica linear e suas diversas atividades biológicas, tais como antibacterianas, antifúngicas, citotóxicas e anti-inflamatória, além de sua fácil modelagem, é precursora de flavonoides encontrados em vegetais, inseridos ao organismo humano pela alimentação. O estudo analisa e compreende as propriedades geométricas e elétricas da molécula, além de obter resultados teóricos da estrutura de cristal de raios-x relatada da chalcona 1-{4-hydroxy-3-[(pyrrolidin-1yl)methyl]phenyl}-3-phenylprop2-en-1-one (HPMP). Para efeito das propriedades geométricas foram analisados 19 solventes, utilizando um modelo de solvatação contínua, IEF-PCM, utilizando o funcional B3LYP com o conjunto de função de base 6311++G (d,p). Os resultados foram sobrepostos no cristal por meio do programa Mercury 3.9, obtendo valores de máxima distância e RMSD por essa sobreposição da estrutura cristalina e pelos 19 solventes analisados, o que apresentou maior desvio da raiz média quadrática (RMSD) foi o Clorofórmio (CHCL₃). Quanto maior esse valor, maior a diferença entre a molécula do cristal e a molécula otimizada, contudo, essa variação ocorre pela interação entre o soluto e o solvente que é determinado pelo potencial dielétrico, no qual há uma interação intermolecular entre as moléculas, além do melhor resultado na óptica linear em relação aos demais solventes aqui estudados. O Heptano foi o que apresentou maior distanciamento entre os átomos do composto HPMP e da molécula otimizada (máxima distância). Entretanto, para análise das propriedades dielétricas, os cálculos foram

executados utilizando o DFT/B3LYP/6-311++G(d,p), neste foram os solventes polares que obtiveram maior ganho tanto na polarizabilidade média quanto no momento dipolar total.