

O EFEITO DO SOLVENTE NA ESTRUTURA GEOMÉTRICA MANNICH À BASE DE CHALCONA

Figueiredo, Lucas¹, Valverde, Clodoaldo²

¹UniEvangélica, Engenharia Mecânica

²UniEvangélica, Unip, Ueg, Engenharia Mecânica

INTRODUÇÃO

Neste trabalho foi estudado o efeito do solvente na estrutura geométrica do cristal Mannich (1-{4-hydroxy-3-[(pyrrolidin-1-yl)methyl]phenyl}-3-phenylprop-2-en-1-one) de fórmula estrutural $C_{20}H_{21}NO_2$, [Figura 1]. Esse composto possui várias aplicações na parte biológica, tais como, citotóxica (Bilginer et al., 2013), anti-inflamatório (Sahin et al., 2010) e anticonvulsivante (Gulet et al., 2004). As cetonas não saturadas presentes na estrutura química de Mannich são responsáveis pela sua citotoxicidade¹⁻².

OBJETIVOS

Otimizar a estrutura (1-{4-hydroxy-3-[(pyrrolidin-1-yl)methyl]phenyl}-3-phenylprop-2-en-1-one) utilizando-se o método quântico da Teoria do Funcional da Densidade (DFT). Para se calcular o desvio padrão e a maior distância máxima em comparação a uma molécula a outra foi utilizado o programa Mercury. O objetivo principal desta busca é localizar um ponto de mínimo na superfície de energia potencial e gerar a estrutura tridimensional correspondente, para isso, o método de cálculo realizado foi o cálculo da energia de diversas possíveis conformações do sistema, até chegar a um mínimo.

METODOLOGIA

Foi utilizado o método da Teoria do Funcional da Densidade (DFT, do inglês *Density Functional Theory*), no nível B3LYP/6-31 g(d,p), utilizando-se o método computacional chamado de "PCM" (Polarizable Continuum Model, nesta abordagem, a cavidade molecular é representada por esferas sobrepostas, uma para cada átomo, cujo raio depende da natureza do átomo) para tratar o solvente e suas respectivas constantes dielétricas. Foi apresentado os valores, na tabela 1, do RMSD (desvio padrão) e Dist. Máx. Os meios solventes utilizados são: Argônio ($\epsilon = 1,430$), Acetona ($\epsilon = 20,493$), Metanol ($\epsilon = 32,613$) e Heptano ($\epsilon = 1,9113$), também foi trabalhado no gás ($\epsilon = 1,00$)³⁻⁶.

RESULTADOS

É demonstrado a sobreposição da molécula em diferentes meios solventes e no gás, onde cada um possui sua constante dielétrica. Nas "figuras 2,3,4" é demonstrado a sobreposição da estrutura original e a estrutura com o solvente e com o gás otimizado. Os resultados da "tabela 1", mostram a diferença entre o desvio padrão (RMSD) e a distância máxima da molécula (Dist. Máx) em comparação a molécula original. Outro fator importante a qual foi analisado é que quanto maior a constante dielétrica do solvente, menor será a distância máxima de uma estrutura a outra, foi notado este fator analisando o resultado da distância máxima do "Metanol" em comparação com as outras distâncias dos outros solventes e do gás.

FIGURAS E TABELAS

Solventes	RMSD	Dist. Máx.
Fase Gás	0.5092	0.9444
Argônio	0.5191	0.9539
Metanol	0.5227	0.9174
Acetona	0.5243	0.9232
Heptano	0.5255	0.9590

Tabela 1: – Comparação entre o Input e Solventes (RMSD e Dist. Máx)

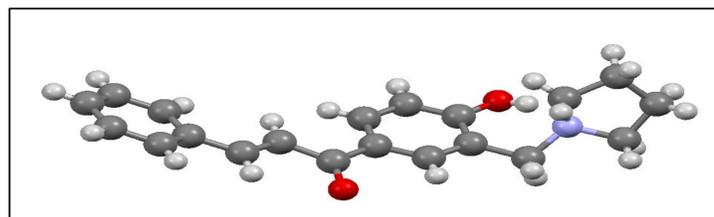


FIGURA 1: Estrutura molecular do cristal 1-{4-hydroxy-3-[(pyrrolidin-1-yl)methyl]phenyl}-3-phenylprop-2-en-1-one $C_{20}H_{21}NO_2$

FONTE: do autor

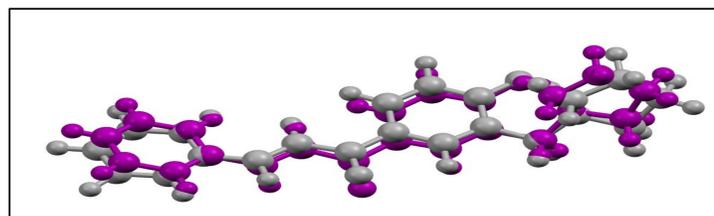


FIGURA 2: Overlay entre o INPUT (estrutura roxa) e o gás (estrutura cinza)

FONTE: do autor

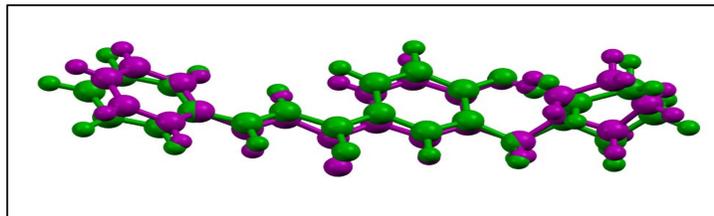


FIGURA 3: Overlay entre o INPUT (estrutura roxa) e o argônio (estrutura cinza)

FONTE: do autor

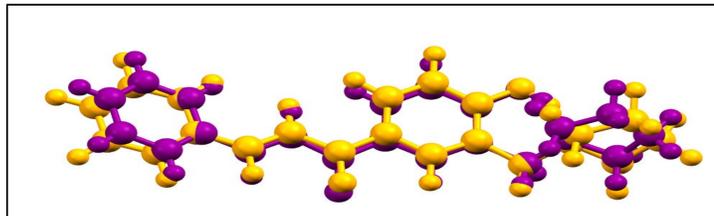


FIGURA 4: Overlay entre o INPUT (estrutura roxa) e a acetona (estrutura cinza)

FONTE: do autor

REFERÊNCIAS

- 1 A. Aydin, M. Akkurt, H.I. Gul, K.O. Yerdelen, R.C. Celik. *Acta Cryst.* (2016). E72, 696-698.
- 2 A. N. Castro, F.A.P. Osório, R.R. Ternavisk, H.B. Napolitano, C. Valverde, B. Baseia, *Chem. Phys. Lett.* 681, 110 (2017).
- 3 C. Valverde, R.F.N. Rodrigues, D.F.S. Machado, B. Baseia, H.C.B. de Oliveira, *J. Mol. Model.* 23, 122 (2017).
- 4 R. F. N. Rodrigues et al., *PLoS One.* 12, e0175859 (2017).
- 5 ORGANICA EXPERIMENTAL. Disponível em: www.feis.unesp.br/Home/departamentos/fisicaequirmica/relacaodoce ntes973/jeanricharddasnoymarinho/orgânica-experimental.pdf. Acesso em: 24 out. 2018
- 6 PRODUTOS CRIOBRAS. Disponível em: www.criobras.com.br/f/produtos/5470.pdf. Acesso em: 24 out 2018