

## COMPARAÇÃO DO EFEITO DE SOLVENTES POLARES NO INPUT E NA FASE GÁS DO CRISTAL DERIVADO DE CHALCONA

SILVA, Vitória Eduarda Gomes<sup>1</sup>, VALVERDE, Clodoaldo<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> CAMPUS DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLÓGICAS-UEG, <sup>2</sup> UNIVERSIDADE PAULISTA LICENCIATURA EM FÍSICA

### INTRODUÇÃO

Neste trabalho estudamos o efeito do solvente polar na estrutura geométrica do composto (E)-1-(4-Nitrofenil)-3-fenilprop-2-en-1-ona (Chalcona) de fórmula estrutural  $C_{15}H_{11}NO_3$  e deste mesmo cristal na fase gás. Os derivados de chalconas são uma classe de compostos importantes que possuem antiprotozoários, anti-helmínticos, amebicidas, antiulcerosos, atividades antivirais, inseticidas, antibacterianas, anticancerosas, citotóxicas e imunossupressoras [1]. O cristal ( $C_{15}H_{11}NO_3$ ) foi otimizado pelo método de DFT (Teoria do Funcional da Densidade) e podendo notar então, que as propriedades geométricas de uma molécula se modificam em diferentes meios solventes e fase gás.

### OBJETIVOS

Através do método de DFT (Teoria do Funcional da Densidade) que é usado para calcular a energia e as propriedades das moléculas pelo cálculo da densidade eletrônica, o objetivo é calcular o RMSD (desvio padrão) e a distância máxima que existe entre os átomos mais distantes das moléculas comparadas. Então, otimizar o cristal ( $C_{15}H_{11}NO_3$ ) em meios solventes, depois otimizarmos o mesmo cristal ( $C_{15}H_{11}NO_3$ ) em fase gás e comparar os valores encontrados de suas propriedades nos dois casos.

### METODOLOGIA

Utilizamos o método de DFT (Teoria do Funcional da Densidade) usando o nível B3LYP na base 6-311++G(d,p), que trata o solvente por meio de constantes dielétricas ( $\epsilon$ ). Os cálculos foram realizados numericamente baseado no método dos campos finitos [2]. Foram calculados o desvio padrão (RMSD) e as distâncias máximas nos meios solventes, como podemos ver na tabela 1 e 2. Os meios solventes polares utilizados são: tetraidrofurano ( $\epsilon = 7,42$ ), diclorometano ( $\epsilon = 8,93$ ), ácido fórmico ( $\epsilon = 51,1$ ), água ( $\epsilon = 78,35$ ) e n-metilformamida ( $\epsilon = 181,56$ ) [3-5]. Veremos nas imagens algumas sobreposições do INPUT da molécula em diferentes meios solventes e sobreposições do cristal na fase gás, também em meios solventes.

### RESULTADOS

Os diferentes meios solventes tem constantes dielétricas em valores distintos. Na tabela 1 será apresentado as alterações nos parâmetros geométricos da estrutura do cristal em diferentes meios solventes. E a tabela 2 apresentará as alterações nos parâmetros geométricos da estrutura do cristal na fase gás em meios solventes. Onde o desvio padrão (RMSD) e distancia máxima na tabela 1 tem o menor valor no meio solvente diclorometano e o maior valor no meio solvente n-metilformamida e na tabela 2 o menor valor acontece no meio solvente tetraidrofurano e o maior valor no meio solvente n-metilformamida.

Nas figuras 1 e 2 apresentamos a sobreposição do cristal ( $C_{15}H_{11}NO_3$ ) em meios solventes, e nas figuras 3 e 4 apresentamos a sobreposição do cristal na fase gás nos mesmos meios solventes. Concluindo então que há uma mudança nos valores das propriedades deste cristal e quando o mesmo cristal se encontra em fase gás, concluindo ainda que a mudança também ocorre decorrente a variação das constantes dielétricas dos meios solventes que foram envolvidos.

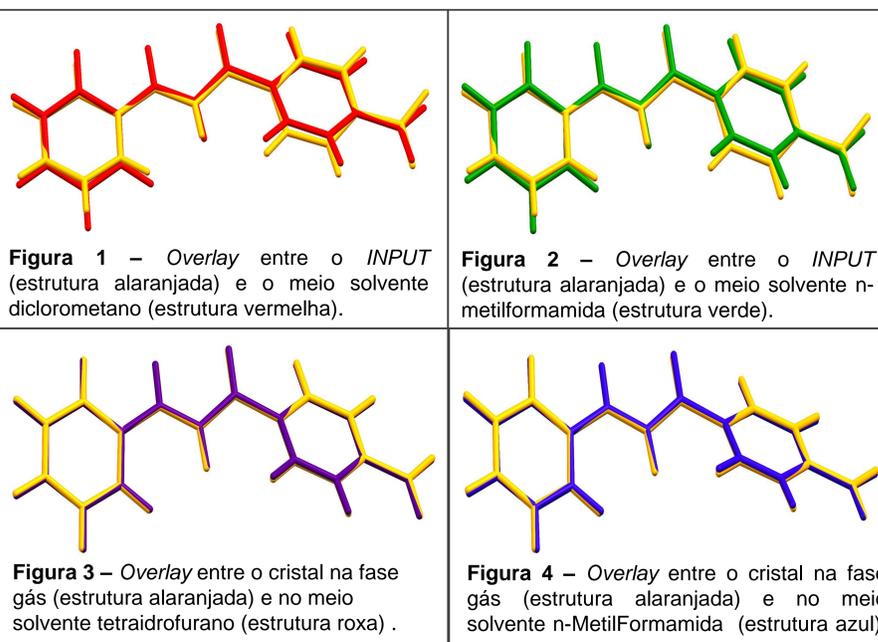
### FIGURAS E TABELAS

Solventes	RMSD	Dist. Máx.
Diclorometano	0.2941	0.5884
Tetraidrofurano	0.2942	0.5906
Ácido Fórmico	0.2946	0.6000
Água	0.2948	0.6013
n-MetilFormamida	0.2950	0.6032

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

Solventes	RMSD	Dist. Máx.
Tetraidrofurano	0.0332	0.0519
Diclorometano	0.0345	0.0541
Ácido Fórmico	0.0419	0.0688
Água	0.0426	0.0702
n-MetilFormamida	0.0436	0.0720

Tabela 2 – Comparação entre Fase Gás e Solventes (RMSD e Dist. Máx.).



### REFERÊNCIAS

- [1] H.L. Jing, Acta Cryst. E65, o2510 (2009).
- [2] J. L. Gao, in: K. B. Lipkowitz, D. B. Boyd (Eds.), Reviews of Computational Chemistry, 7, 119 (1996).
- [3] A. N. Castro, F.A.P. Osório, R.R. Ternavisk, H.B. Napolitano, C. Valverde, B. Baseia, Chem. Phys. Lett. 681, 110 (2017).
- [4] C. Valverde, R.F.N. Rodrigues, D.F.S. Machado, B. Baseia, H.C.B. de Oliveira, J. Mol. Model. 23, 122 (2017).
- [5] R. F. N. Rodrigues et al., PLoS One. 12, e0175859 (2017).