Estudo da estrutura eletrônica e da geometria da molécula Bromo-chalcona Sulfonamida utilizando Teoria do Funcional da Densidade

Fernanda Borges Carvalho^{1*}(PG), Ademir João Camargo¹(PQ) e Solemar Silva Oliveira¹(PQ)

¹ Grupo de Química Teórica e Estrutural de Anápolis (QTEA) – Campus de Ciências Exatas e Tecnológicas (CCET) – Universidade Estadual de Goiás (UEG)

fborgescarvalho@gmail.com

Palavras-chave: DFT, chalcona, estrutura eletrônica, geometria.

Introdução

Chalconas representam um grupo de substâncias naturais encontradas em flores, frutas, mel e em algumas substâncias processadas como chá e vinho (DOMINGUEZ *et al.*, 2001; ELSOHLY *et al.*, 2001). São precursoras dos flavonoides, compostos que apresentam uma grande variedade de atividades de interesses farmacológicos. Quimicamente, esses compostos são chamados de 1,3-difenil-2-propen-1-ona, classificados como cetonas α,β -insaturadas. A combinação entre carbonila e grupo olefínico cria uma reativa cadeia ceto-etileno que pode propiciar a conjugação entre dois anéis aromáticos. Esta característica lhe fornece potencial biológico e antioxidante. (PATIL, MAHAJAN, KATTI, 2009). Compostos contendo agrupamento sulfonamida, -SO₂NH-, são amplamente utilizados como agentes antibactericidas devido seu baixo custo, baixa toxicidade e grande eficácia contra doenças bacterianas comuns (ÖZBECK, *et al.*, 2007). O grupo sulfonamida ocorre em compostos biologicamente ativos, que inclui drogas antimicrobiais, antitireóides, antitumorais e antimalárias (OZDEMIR *et al.*, 2010) e também como recentemente descoberto, antidiuréticas e antiglaucomas (KASIMOĞULLARI *et al.*, 2010). Devido ao alto potencial antioxidante é de suma importância determinar um estudo da reatividade química desses compostos. Métodos de modelagem molecular são amplamente utilizados na busca da compreensão de estruturas moleculares simples (pequenas moléculas) e complexas (enzimas, proteínas, polímeros). A tecnologia computacional possibilita grandes avanços na obtenção de resultados em estruturas cada vez mais complexas. Dentre os métodos a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) apresenta-se como um dos mais importantes e consolidados na literatura.

Metodologia

No presente trabalho apresentamos um estudo teórico das propriedades geométricas e eletrônicas da Bromo-chalcona Sulfonamida no vácuo utilizando a Teoria do Funcional da Densidade (DFT). Os cálculos de DFT foram realizados usando o nível de teoria em M062-X/6-311++G(2d,p) [REF], determinando as distâncias e os ângulos interatômicos. Analisamos o Mapa de Potencial Eletrostático (MPE) para compor as regiões de maiores e menores densidades eletrônicas. Determinamos os orbitais de fronteira HOMO/LUMO para localizar regiões onde os elétrons de maior e menor energia estão concentrados, podendo assim descrever propriedades quânticas fundamentais no estudo de reações químicas.

Resultados e discussão

Na Fig. 1 (a), MPE da molécula, as regiões negativas (vermelho, amarelo) representam os sítios de ataque eletrofílicos e as regiões positivas com densidades eletrônicas inferiores (azul, verde) representam os sítios de ataque nucleofílicos. Os

orbitais HOMO e LUMO (Fig. 1 b e c) da molécula de Bromo-chalcona Sulfonamida, encontram-se envolvendo toda molécula, exceto no anel aromático ligado ao grupo sulfonamida e no grupo metila ligado ao C15. Sobre a simetria, as ligações dos orbitais HOMO e LUMO (Fig. 01 b e c) são do tipo π ligante (π ligante). Os orbitais HOMO apresentam energia de aproximadamente -7,69810 eV e os orbitais LUMO -1,80085 eV. O gap HOMO-LUMO foi obtido com DFT usando o funcional M062-X/6-311++G(2d,p), e tem energia de aproximadamente, 5,897 eV que corresponde a um comprimento de onda de 203 nm.

Figura 1. a) MPE, b) HOMO e c) LUMO da molécula de Chalcona.

Conclusão

Uma análise do Mapa de Potencial mostra claramente que os potenciais negativos eletrostáticos estão nos átomos eletronegativos e os locais de potenciais positivos estão nos átomos de hidrogênio. Essa análise sugere que um estudo com um solvente, como a água, possa fornecer resultados interessantes tal como formação de ligações de hidrogênio.

Agradecimentos

Agradecimento a CAPES.

Referências

- DOMINGUEZ, J. N.; CHARRIS, J. E.; LOBO, G. *Eur. J. Med. Chem.* 2001, 36, 555.
- ELSOHLY, H. N.; JOSHI, A. S.; NIMROD, A. C.; WALKER, L. A.; CLARK, A. M. *Plant Med.* 2001, 67,87.
- PATIL, C. B.; MAHAJAN, S. K.; KATTI, S. A. *J. Pharm. Sci and Res* v.3, p.11 – 22, 2009.
- ÖZBEK, N.; KARTICIOGLU, H.; KARACAN, N.; BAYKAL, T.; “Synthesis, characterization and antimicrobial activity of new aliphatic sulfonamide”. *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, 2007, v. 15, p. 5105-5109.
- OZDEMIR, U. O.; GUVENÇ, P.; SAHIN, E.; HAMURCU, F.; “Synthesis, characterization and antibacterial activity of new sulfonamide derivatives and their nickel (II), cobalt (II) complexes”. *Inorganica Chimica Acta*, 2009, v. 362, p. 2613-2618.
- KASIMOĞULLARI, R.; BULBUL, M.; ARSLAN, B. S.; GOKÇE, B.; “Syntheses, characterization and antiglaucoma activity of some novel pyrazole derivatives of 5-amino1,3,4-thiadiazole-2-sulfonamide”. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 2010, p.1-5.