COEQ
CONGRESSO ONLINE
DE ENGENHARIA QUÍMICA

ISBN: 978-65-86861-56-3

CÁLCULO DO ESPECTRO DE ABSORÇÃO DA CHALCONA

Congresso Online de Engenharia Química, 1ª edição, de 09/11/2020 a 12/11/2020
ISBN dos Anais: 978-65-86861-56-3

MORAIS; Jefferson Lorençoni [1], SOUSA; Wilker Cássio [2], VALVERDE; Clodoaldo [3], LOPES; Yago Francisco [4], SILVA; Poliana Maia [5]

RESUMO

Os flavonoides são um dos maiores grupos de metabolitos secundários de origem natural com ampla atividade biológica, são constituídos por três anéis fenólicos, possui um anel benzeno que é condensado com o sexto carbono do terceiro anel,e o terceiro se apresenta na forma pirona. Possui ação anti-inflamatória, antialérgica e antioxidante. Suas principais classes são flavonóis, flavonas, flavanas, isoflavonoides e antocianinas. As chalconas são consideradas flavonoides de cadeia aberta amplamente distribuídas no reino vegetal, são produtos intermediários e finais na biossíntese de flavonoides, considerados importantes na pigmentação de flores. Possui a função atrativa para polinização, além de desempenharem ação contra patógenos e insetos. Apesar da sua ocorrência em plantas, podem ser sintetizadas também em laboratório. As chalconas possuem atividade antioxidante, anticâncer, antimicrobiana, antiinflamatória e outras. São alvos de interesse por pesquisadores em universidades e pela indústria farmacêutica. O interesse da síntese de chalconas e a sua utilização,está relacionado a sua estrutura e também as possibilidades de modificações,que esta apresenta em relação ao seu mecanismo de estrutura e atividade. São características básicas desta abertura de um terceiro anel, presentes nas classes de flavonoides, o que torna possível a formação de uma ligação dupla com os carbonos denominados α e β na função carbonila. As chalconas são classificadas como cetonas α ,β-insaturadas, os grupamentos aromáticos são conectados a três carbonos referentes a porção olefinica e carbonila, apresentam núcleo 1,3-diarilprop-2-en-1-ona, excelentes no desenvolvimento de fármacos. O objetivo deste trabalho,é de analisar as transições eletrônicas que acontecem nos estados excitado e a partir disso analisar o comprimento de onda que a molécula absorve. Os cálculos de espectrometria de absorção foram efetuadas no ultravioleta visível. Usado uma otimização geometrica no funcional B3LYP na base 6-311 ++ G (D,P). Os meios solventes utilizados foram água, acetona, etanol, metanol e um cálculo realizado no estado gasoso, utilizando o modo matemático no metodo DFT (Teoria do Funcional de Densidade), que é um modo computacional mais ecônomico, muito utilizado para cálculos quanticos, podendo ser usado para uma compreensão funcional de cada interação existente na Chalcona,e podendo verificar a estruturação molecular para um estudo, relacionado as excitações eletrônicas fortes existente em cada molecula e os pontos não ligantes,verificando as forças nucleares fortes e fracos, levando então para um estudo aprofundado para o desenvolvimento de um novo farmaco. Para a análise estrutural utilizaremos o método de

[1] UNIVERSIDADE ESTADUAL DE GOIÁS, lorenconi12112009@hotmail.com
[2] Instituto Federal de Goiás, eng.wilker@yahoo.com
[3] Universidade Paulista, valverde@ueg.br
[4] UNIVERSIDADE ESTADUAL DE GOIÁS, yagolopes-f@hotmail.com
[5] UNIVERSIDADE ESTADUAL DE GOIÁS, polianamaia07@hotmail.com

Hirshfield que consiste na determinação das posições atômicas na molécula do cristal definindo o espaço ocupado por cada uma. As superfícies de Hirshfield definem a função peso para o átomo na molécula de interesse, sendo assim possível calcular as densidades eletrônicas dos átomos que compõe a molécula e da proximidade e identificação dos átomos vizinhos. Assim a superfície de Hirshfield nos permite calcular as interações intermoleculares pela distribuição da densidade eletrônica na célula unitária do cristal de Chalcona com a equalização da eletronegatividade dos átomos sendo possível compreender cada interação entre os mesmos e correlacionar o momento de dipolo.

PALAVRAS-CHAVE: Chalcona, Geometria Molecular, Transição Eletrônica, Estado Excitado, Absorção.

[1] UNIVERSIDADE ESTADUAL DE GOIÁS, lorenconi12112009@hotmail.com
[2] Instituto Federal de Goiás, eng.wilker@yahoo.com
[3] Universidade Paulista, valverde@ueg.br
[4] UNIVERSIDADE ESTADUAL DE GOIÁS, yagolopes-f@hotmail.com
[5] UNIVERSIDADE ESTADUAL DE GOIÁS, polianamaia07@hotmail.com