

## **ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL DO COMPOSTO 5 - (( 5 - CHOROPIRIDIN - 2 - ILAMINO ) METILENO) 2,2 - DIMETIL - 1,3 - DIOXANO - 4,6 - DIONA**

MARIA NAIARA LOURENÇO GONÇALVES, ALEXANDRE MAGNO RODRIGUES TEIXEIRA, BEATRIZ GONÇALVES CRUZ,

O composto 5 - (( 5 - choropiridin - 2 - ilamino ) metileno) 2,2 - dimetil - 1,3 - dioxano - 4,6 - diona (  $C_{12}H_{11}ClN_2O_4$  ) é um sólido cristalino branco derivado do ácido de Meldrum. Alguns derivados do ácido de Meldrum podem ser usados em fins terapêuticos, como no tratamento de doenças parasitárias (ex: leishmaniose e Doença de Chagas) e no tratamento de doenças antivirais, no caso das infecções por herpes, em diagnóstico e terapia de doenças; como antitumoral; no combate de endo- e exo- parasitos, e como aditivos de fluidos lubrificantes [1,2]. Esse trabalho tem como objetivo principal estudar as propriedades estruturais e vibracionais da substância 5 - (( 5 - choropiridin - 2 - ilamino ) metileno) 2,2 - dimetil - 1,3 - dioxano - 4,6 - diona por espectroscopia infravermelho com transformada de Fourier (FT-IR) e cálculos de primeiros princípios baseados na Teoria do Funcional da Densidade (DFT). A medida de espectroscopia infravermelha foi realizada no laboratório de física da Universidade Regional do Cariri - URCA, em uma máquina de infravermelho de nome (Cary 600 séries FTIR Spectrometer), pela técnica do pastilhamento com KBr. Nesta técnica um miligrama da amostra finamente moída foi misturado com cerca de 100 mg de pó de brometo de potássio seco, sendo que, para fazer essa mistura foi usado um pistilo e um almofariz, logo após, a mesma foi prensada em um molde que produziu um disco transparente. O disco foi posicionado no feixe do instrumento para exame espectroscópico, sendo produzidos espectros excelentes. Os cálculos computacionais foram realizados utilizando os softwares: Gaussian e Gaussview para obtenção das propriedades estruturais e vibracionais do composto 5 - (( 5 - choropiridin - 2 - ilamino ) metileno) 2,2 - dimetil - 1,3 - dioxano - 4,6 - diona. As atribuições dos modos vibracionais foram realizadas usando o software VEDA. O espectro de Infravermelho (FT-IR) apresentou vibrações moleculares do tipo deformação (na maioria das bandas entre 471  $cm^{-1}$  á 1488  $cm^{-1}$ . As bandas observadas em 1547  $cm^{-1}$  e 1683  $cm^{-1}$  correspondem a mistura de modos vibracionais, principalmente, dos estiramentos CC e CN. Já na região de 2937  $cm^{-1}$  à 3207  $cm^{-1}$  são observadas bandas de estiramentos dos grupos CH, CH<sub>3</sub>. Em relação as deformações fora do plano (estas foram observadas entre as bandas 403  $cm^{-1}$  e 536  $cm^{-1}$  mas com menor frequência.

**PALAVRAS-CHAVE:** COMPOSTO HETEROCICLO AROMÁTICO; CÁLCULOS COMPUTACIONAIS; ESPECTRO DE INFRAVERMELHO

**ÀREA TEMÁTICA:** CIÊNCIAS BIOLÓGICAS (PESQUISA)

**FORMA DE APRESENTAÇÃO:** RELATO DE EXPERIÊNCIA