ATRIBUIÇÃO DAS PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E VIBRACIONAIS DO COMPOSTO 5-ISOPROPIL-2-METILFENOL ATRAVÉS DE CÁLCULOS DFT

BEATRIZ GONÇALVES CRUZ, MARIA NAIARA LOURENÇO GONÇALVES, LÍDIA CORREIA PINTO, CÍCERA JANAINE CAMILO, ALEXANDRE MAGNO RODRIGUES TEIXEIRA

IntroduçãoO composto quimicamente denominado 5-isopropil-2-metil-fenol, popularmente conhecido como Carvacrol é um fenol monoterpenóide, possui fórmula molecular C10H14O e está presente em muitos óleos essenciais de plantas, especialmente nos gêneros Origanum e Thymus [1]. Trata-se de um líquido de baixa toxicidade de coloração amarelo claro com pouca solubilidade em água de característica pungente e odor aromático. Esse monoterpeno possui uma grande variedade de atividades biológicas benéficas, tais como antibacteriana, antifúngica e antioxidante [1]. O Carvacrol isolado reduz as contorções abdominais induzidas por ácido acético e inibe as fases iniciais (dor neurogênica) e tardias (dor inflamatória), apresentando ação analgésica local [2]. Nesse trabalho realizamos um estudo das propriedades estruturais e dos modos vibracionais do Carvacrol através de cálculos computacionais usando a Teoria do Funcional da Densidade (DFT). MetodologiaFoi utilizado o programa de estrutura eletrônica Gaussian para a realização de cálculos de primeiros princípios e obtermos as propriedades estruturais e vibracionais do 5-isopropil-2-metil-fenol. As coordenadas foram ajustadas de acordo com o número de onda vibracional e vetor de onda, previsto através de cálculos DFT com Lee-Yang-Parr correlação funcional (B3LYP) e a base definida 6-31 G (d, p). A descrição dos modos normais de vibração foram feitas com base na Distribuição de Energia Potencial (PED%), calculadas usando o programa Veda.Resultados e DiscussãoA molécula C10H14O possui 25 átomos, portanto existem 75 graus de liberdade, sendo esperados 69 modos vibracionais para o Carvacrol. Através de cálculos computacionais identificamos os modos vibracionais da molécula. Nas regiões de 35cm-1 a 148 cm-1 uma deformação molecular do tipo torção (?) dos CCC, entre as regiões de 1400 cm-1 a 1480 cm-1 deformação do tipo sacudida (wag) dos C-H, na banda de 1500 cm-1 a 1522 cm-1 deformação do tipo tesoura (sc) entre os CH2 e na região de 1630 cm-1 a 3800 cm-1 estiramento (?) dos C-H. As bandas de maior intensidade encontradas no espectro FT-Raman foram 760 cm-1 como sendo uma deformação (?) e 1623 cm-1 como estiramento (?) do C-C. No espectro de FT-IR foi encontrada as bandas de 811 cm-1 e 1420 cm-1 como sendo as mais fortes, se tratando respectivamente, de uma torção (?) do C-C e de uma deformação (?? H-CC e na banda 1259 cm-1 foi encontrada um estiramento (?) dos C-C. Essas bandas classificadas como as mais fortes já tinham sido reportadas na literatura por Baranska, 2005 [3]. Conclusões A utilização do programa de estrutura eletrônica Gaussian permitiu obter as propriedades estruturais e vibracionais da molécula.

PALAVRAS-CHAVE: CARVACROL, CÁLCULOS DFT, VIBRAÇÕES MOLECULARES

ÀREA TEMÀTICA: QUÍMICA DE PRODUTOS NATURAIS

FORMA DE APRESENTAÇÃO: ORAL