

## **ESTUDO VIBRACIONAL E DE ORBITAIS DE FRONTEIRA DO COMPOSTO (4E)-4-(2-HIDROXIBENZILIDENOAMINO) -1,2-DIHDRO-2,3-DIMETIL-1-FENILPIRAZOL-5-ONA.**

FRANCISCO HERMESSON GONÇALVES ARAÚJO DO NASCIMENTO, OTACILIO VILAR SILVESTRE DO NASCIMENTO,  
HERCULES DE SOUZA SANTANA, CARLOS EMIDIO SAMPAIO NOGUEIRA

O composto (4E)-4-(2-hidroxibenzilidenoamino) -1,2-dihidro-2,3-dimetil-1-fenilpirazol-5-ona, de fórmula C<sub>18</sub>H<sub>17</sub>N<sub>3</sub>O<sub>2</sub>, denotada neste trabalho por GM1 (Grupo de Moléculas 1), é uma Base de Schiff que derivada 4-aminoantipirina. As bases de Schiff e seus compostos têm uma ampla variedade de aplicações industriais e farmacológicas. Dentre estas últimas podemos citar as ações antibacteriana, antifúngica, antimicrobiana e anti-HIV comumente associadas a estes compostos. A GM1, em particular, possui uma reconhecida atividade antimicrobiana. Neste trabalho, estudamos as propriedades vibracionais e dos orbitais de fronteira da substância GM1 através do método de Teoria do Funcional da Densidade (DFT), utilizando a base 6-31G(d,p) através do Software de Química Computacional Gaussian 03. A estrutura molecular foi otimizada e a atividade Raman calculada analiticamente. A estrutura otimizada foi comparada aos resultados obtidos através da técnica de difração de raios-X. Os modos vibracionais foram analisados através da Distribuição da Energia Potencial (PED) utilizando-se o software VEDA e os resultados computacionais foram comparados aos estudos espectroscópicos realizados através das técnicas de Espectroscopia Raman e Infravermelha. Além da atribuição dos modos vibracionais, foi calculado o gap de energia entre o orbital molecular ocupado mais alto (HOMO) e o orbital molecular não ocupado mais baixo(LUMO), de modo que com os dados obtidos possamos apontar os possíveis sítios de reação para este composto.

**PALAVRAS-CHAVE:** FÍSICA:ORBITAL DE FRONTEIRA.; TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE (DFT):GAUSSIAN 03.:SULTADOS OBTIDOS A

**ÁREA TEMÁTICA:** FÍSICA

**FORMA DE APRESENTAÇÃO:** PÔSTER