

289

DETERMINAÇÃO DE DESCRITORES QUÂNTICOS DE ADUTOS DE BAYLIS-HILLMAN COM PROPRIEDADES ANTINEOPLÁSICAS POR MODELAGEM MOLECULAR. Charles Dal Castel, Luiz Antonio Mazzini Fontoura (orient.) (ULBRA).

Adutos de Baylis-Hillman derivados do acrilato de metila apresentam propriedade antineoplásica. Testes *in vitro* da atividade biológica de 14 destes compostos (figura 1) frente a 8 linhagens de células tumorais humanas mostraram que a atividade está relacionada com a presença de grupos retiradores de elétrons. Neste trabalho, são apresentados os resultados do cálculo de descritores quânticos dos compostos 1-14, utilizando os métodos de orbital molecular semi-empírico (AM1 e PM3) e *ab initio* (HF e B3LYP nas bases 6-31G*, 6-31G** e 6-31+G*). Foram estimadas as energias dos OMF, o potencial químico, a dureza e a eletrofilicidade. Os compostos podem ser ordenados conforme seus potenciais químicos na seguinte seqüência de substituintes: $\text{NO}_2 > \text{CH}_3\text{SO}_2 > \text{CN} > \text{CF}_3 > \text{CF}_3\text{O} > \text{Cl} > \text{H} > \text{CH}_3\text{O} > \text{HO}$. Os descritores quânticos calculados poderão ser utilizados em posterior estudo de Relação Quantitativa Estrutura Atividade (QSAR).