

263

DETERMINAÇÃO DE DESCRITORES QUÂNTICOS DE ADUTOS DE BAYLIS-HILLMAN COM POTENCIAL ATIVIDADE ANTI-NEOPLÁSICA POR CÁLCULO AB INITIO. Sheila

Cristina Nobre Martins, Charles Dal Castel, Carlos Felipe G da Silva, Luiz Antonio Mazzini Fontoura

(orient.) (ULBRA).

2-[fenil(hidroxi)metil]acrilato de metila (**1**) e seus derivados *p*-substituídos no grupo arila (OH, OMe, OCF₃, CF₃, SO₂Me, CN, NO₂), adutos de Baylis-Hillman obtidos por reação entre o acrilato de metila e o benzaldeído, são conhecidos por sua atividade anti-neoplásica. A atividade biológica é dependente do efeito eletrônico do substituinte ligado ao grupo arila e é mais pronunciada nos compostos com maior eletrofilicidade. Assim, derivados de **1** obtidos por substituição do grupo metoxicarbonil por outros grupos retiradores de elétrons são potencialmente ativos. Neste trabalho, a partir do cálculo quântico (HF/6-31G*, Pc Spartan 02) das energias dos OMF, determinamos a eletrofilicidade, dureza e potencial químico de **1**, da 2-[fenil(hidroxi)metil]acroleína (**2**), da 3-[fenil(hidroxi)metil]butenona (**3**) e da 2-[fenil(hidroxi)metil]acrilonitrila (**4**) e dos respectivos derivados aril-substituídos. A análise conformacional de **1**, **2** e **3** indicou duas geometrias de equilíbrio correspondentes aos conformeros *s-trans* e *s-cis*. Nos três casos, a primeira delas é mais estável. A menor diferença de energia é observada no caso do éster **1**, visto que ambas são estabilizadas por associação de hidrogênio, o que não ocorre no caso do aldeído e da cetona. O mais alto potencial químico é do éster **1** (-2,9 eV) mostrando o menor caráter retirador de elétrons do grupo metoxicarbonil, quando comparado aos demais. Pela mesma razão, é o de menor eletrofilicidade (0,7 eV). O aldeído **2** e a cetona **3** apresentam durezas próximas (5,7 eV), ligeiramente inferior à do éster **1** e da nitrila **4**. Todos, portanto, são eletrófilos moles. Grupos retiradores de elétrons ligados ao anel aromático provocam um decréscimo no potencial químico e um aumento na eletrofilicidade. Grupos doadores exercem o efeito oposto.