

## Estudo computacional da influência do grupo nitro na propriedade antioxidante do Eugenol

Eder J. de Melo(IC)<sup>1</sup>, Virna P. Araújo(IC)<sup>1</sup>, Antonio W. Silva(IC)<sup>1</sup>, Luiz. A. S. Romeiro (PQ)<sup>3</sup>, Pedro de Lima Neto (PQ)<sup>2</sup>, Adriano E. O. Lima (PQ)<sup>1</sup>, José R. Cândido Júnior\*(PQ)<sup>1,2</sup>. E-mai: [ederigt@hotmail.com](mailto:ederigt@hotmail.com)

1 - Departamento de Ensino - IFCE - Campus de Iguatu, CEP 63503-790- Cajazeiras - CE

2 - Laboratório de Química Teórica - Depto de Química Analítica e Físico-Química - UFC - Campus do Pici, Bloco 940 - CEP: 60455-960

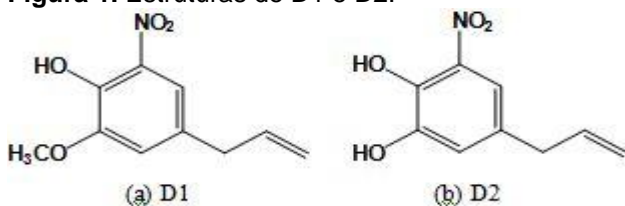
3 - Universidade de Brasília - Campus Darcy Ribeiro. CEP : 70904-970 – Asa Norte – Brasília – DF

Palavras Chave: Antioxidante, derivada, eugenol

### Introdução

O eugenol é um composto fenólico e é um antioxidante exógeno, sendo o constituinte majoritário do óleo essencial do cravo-da-índia. O eugenol é um composto vanilóide por possuir um grupo vanilila em sua estrutura, ao qual está associado sua atividade biológica. Dentre estas, destacam-se suas atividades analgésica, anestésica, protetiva, antibacteriana, antifúngica, antiviral, vasodilatadora e anticâncer<sup>1</sup>. No entanto, durante sua oxidação, o eugenol produz uma quinona metídeo, uma espécie hepatotóxica. Devido à isso, torna-se interessante modificar sua estrutura para reduzir sua toxicidade e aumentar sua capacidade antioxidante. A literatura mostra que derivados nitrados do eugenol, 4-*alil*-2-metóxi-6-nitrofenol (D1) e 5-*alil*-3-nitrobenzeno-1,2-diol (D2), apresentam perfil antioxidante diferente do eugenol. Enquanto D1 não apresenta atividade antioxidante no teste de DPPH, D2 apresenta atividade superior ao do eugenol.<sup>2</sup> A Figura 1 mostra as estruturas de D1 e D2.

Figura 1. Estruturas de D1 e D2.



O grupo nitro é um grupo retirador de densidade eletrônica por efeitos indutivo e mesomérico e, por isso, seria esperado que estabilizasse melhor o radical formado, o que difere dos resultados encontrados na literatura.<sup>2</sup> Devido a isso, este trabalho tem como objetivo estudar a influência do grupo nitro no perfil antioxidante do eugenol através do estudo termodinâmico e cinético da reação dos derivados com o radical hidroxila. Para tanto utilizamos o método DFT-m062x/6-311+(d,p) presente no programa Gaussian 09 presente no cluster do CENAPAD-UFC.

### Resultados e Discussão

Foram gerados radicais fenólicos (RF), metóxidos (RM) e alílicos (RA) por abstração de hidrogênio de D1 e D2. RF1 e RF2 refere-se ao radical fenólico

formado pela abstração H dos grupos das posições orto e meta em relação ao grupo nitro, respectivamente. O estudo da estabilidade termodinâmica foi realizado através dos valores de  $\Delta G_{\text{REAÇÃO}}$  da reação em fase gasosa entre os prováveis sítios com o radical hidroxila. A Tabela 1 mostra os valores de  $\Delta G_{\text{REAÇÃO}}$  para D1 e D2:

Tabela 1. Energias padronizadas dos radicais da molécula D1

Espécie	D1	D2	EUG
RF1	-28,6	-27,7	-31,1
RF2	-	-27,6	-
RA	-39,2	-37,7	-39,2

Estes valores mostram que em ambos os derivados, o RA é o mais estável, por apresentar estruturas de ressonância isoenergéticas. Ao contrário do esperado, não houve diferença de estabilidade entre RF1 e RF2. A captura de hidrogênio em RF1 quebra a ligação de hidrogênio (LH) com o grupo nitro, e a repulsão eletrostática entre os átomos de oxigênio, rotaciona o grupo NO<sub>2</sub>, tirando-o do plano do anel. Desta forma NO<sub>2</sub> não consegue estabilizar D2-RF2 por efeito mesomérico. A presença do grupo nitro diminui a estabilidade de RF, uma vez que D1 e D2 apresentaram menores valores de  $\Delta G^\circ$  para esses radicais.

### Conclusões

Os dados termodinâmicos em fase gasosa, não conseguiram explicar os resultados experimentais de atividade antioxidante dos derivados nitrado do eugenol. São perspectivas futuras deste trabalho, investigar os fatores cinéticos e o efeito do solvente, de modo a tornar o sistema mais realístico e conseguir compreender os dados experimentais.

### Agradecimentos

IFCE - Campus Iguatu, CENAPAD-UFC, Grupo de pesquisa NASA/IFCE

<sup>1</sup> RAMOD, K., ANSARI, S. H. "Eugenol: a natural compound with versatile pharmacological actions." *Javed Ali Nat Prod Commun* 5(12): 1999-2006: 2010.

<sup>2</sup> HIDALGO et al. "Antioxidant Capacity of Eugenol Derivatives" *Quim. Nova*, Vol 32. N° 6, 1467-1470, 2009.