

Aplicação do método semi-empírico topológico em estudos QSPR para compostos halogenados

Anna Celia Arruda (PG)^{1*}, Berenice S. Junkes (PQ)², Rosendo A. Yunes(PQ)² e Vilma E. F. Heinzen (PQ)²

¹Departamento de Física e Química, Universidade de Caxias do Sul, Rua Francisco Getúlio Vargas, 95070-560 Caxias do Sul, RS, ²Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, Campus Universitário, Trindade, 88040-900 Florianópolis, SC, Br. E-mail:acsarrud@ucs.br

Palavras Chave: método semi-empírico topológico, QSPR, compostos halogenados

Introdução

Os estudos de correlações quantitativas entre estrutura e propriedade (QSPRs) são uma alternativa atraente, tanto do ponto de vista econômico como ambiental. Yunes e Heinzen vêm realizando vários estudos de QSPR usando como descritor molecular o índice semi-empírico topológico (I_{ET}).^{1,2} Nesse método a molécula é representada pela teoria do grafo. A contribuição de cada átomo de carbono e grupo funcional é computada por aproximações numéricas capazes de refletir o comportamento cromatográfico experimental e considerações teóricas.³ O objetivo desse trabalho é verificar a aplicabilidade do I_{ET} para a predição de propriedades físico-químicas que estão diretamente relacionadas às forças intermoleculares de compostos halogenados.

Resultados e Discussão

O I_{ET} é expresso como:

$$I_{ET} = S \sum C_i + d_i \quad (1)$$

$$d_i = \log C_1 + \log C_2 + \dots$$

Sendo, C_i = valor atribuído ao fragmento e a cada átomo de Carbono i na molécula; d_i = soma do logaritmo dos valores de cada átomo de carbono adjacente (C_1 , C_2 , C_3 e C_4) e/ou o logaritmo do valor do fragmento. As propriedades selecionadas foram: o ponto de ebulição normal (BP), coeficiente de adsorção de Ostwald gás-hexadecano (γ_{hd}), equilíbrio líquido-vapor (p^{gas}), solubilidade aquosa (p^w), entalpia padrão parcial molar de solvatação ($\Delta_{sol}H^0$), entropia padrão parcial molar de solvatação ($\Delta_{sol}S^0$) e calor de formação (ΔH_f^0).^{4,5,6} O coeficiente de determinação (r^2), desvio padrão (SD) e coeficiente de validação cruzada (r_{cv}^2) foram usados como critério estatístico para julgar a qualidade e potencial de predição dos modelos desenvolvidos. Os resultados, apresentados na Tabela 1, mostram que coeficientes de determinação acima de 0,90 foram obtidos para prognosticar oito propriedades físico-químicas, demonstrando a boa capacidade preditiva dos modelos de QSPR. A alta estabilidade dos modelos é indicada pela concordância entre o r_{cv}^2 e r^2 .

Tabela 1. Correlação linear simples para propriedades físico-químicas usando o I_{ET} e parâmetros estatísticos.

Propriedade s	Equações de regressão	Parâmetros estatísticos			
		N	r	SD	r_{cv}^2
BP	$-102,5073 (\pm 12,7) + 32,1171 (\pm 1,72) I_{ET}$	22	0,986	6,638	0,981
$\log \gamma_{hd}$	$-0,8868 (\pm 0,40) + 0,6240 (\pm 0,056) I_{ET}$	11	0,986	0,140	0,983
$\log p^{gas}$	$1,2838 (\pm 0,13) - 0,6228 (\pm 0,018) I_{ET}$	11	0,998	0,046	0,997
$\log p^w$	$2,3470 (\pm 1,39) - 0,7490 (\pm 0,19) I_{ET}$	11	0,897	0,481	0,866
$\Delta_{sol}H^0$	$6286,7469 (\pm 906) - 5379,3951 (\pm 110) I_{ET}$	13	1,000	317	0,999
$\Delta_{sol}S^0$	$3,4818 (\pm 2,83) - 6,7889 (\pm 0,34) I_{ET}$	13	0,994	0,990	0,992
ΔH_f^0	$-0,8513 (\pm 0,23) - 6,2603 (\pm 0,041) I_{ET}$	15	1,000	0,168	1,000

Conclusões

Nessa investigação a eficiência do I_{ET} foi verificada pela alta qualidade dos modelos QSPRs obtidos, usando um único descritor, demonstrando sua aplicabilidade para prever as propriedades aqui estudadas.

Agradecimentos

UFSC, UCS, CNPq

¹ Heinzen, V. F. E. et al, *J. Molecular Modeling* **2005**, 11, 128-134.

² Junkes, B. S. et al, *Internet Eletron. J. Mol. Des.* **2003**, 2, 1-9.

³ Soares, M. F. et al. *J. Chromatography A*, **1999**, 849,495-506.

⁴ Buchward, P.; Bodor, N. *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, 122, 10671-10679

⁵ Dallos, A.; Kresz, R.; Kováts, E. **2003**, *Fluid Phase Equilibria*, 210, 57-67.

⁶ Luo, Y.; Pacey, P. D. **1992**, *International J. Mass Spectrometry and Ion Processes*, 112, 63-67.