

# Estudo de propriedades eletrônicas por modelagem molecular de tiossemicarbazonas derivadas do 3,4-metilenodioxibenzaldeído

Jorge L. R. de Melos\*<sup>1</sup> (PG), Aurea Echevarria<sup>1</sup> (PQ) e Carlos Maurício Sant' Anna<sup>1</sup> (PQ)

<sup>1</sup>Departamento de Química – ICE – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro – Seropédica – 23.851-970.  
 ribeirluiz2004@yahoo.com.br

Palavras Chaves: Tiossemicarbazonas, Modelagem, HOMO

## Introdução

As tiossemicarbazonas apresentam-se como substâncias promissoras com atividades farmacológicas já relatadas para diversas enfermidades transmitidas por um largo espectro de agentes infectantes: vírus, bactérias e protozoários<sup>1</sup>, além do relato para atividade citotóxica<sup>2</sup> e antitumoral<sup>3</sup>. Neste trabalho, utilizou-se o método semi-empírico com a escolha do hamiltoniano AM-1 do programa SPARTAN-PRO para modelar estruturas de tiossemicarbazonas derivadas do 3,4-metilenodioxibenzaldeído substituído por NO<sub>2</sub>, NH<sub>2</sub>, OH, Br e CN, com o objetivo de estudar a contribuição desses substituintes sobre as propriedades eletrônicas dos sítios reacionais dessas substâncias<sup>4</sup>.

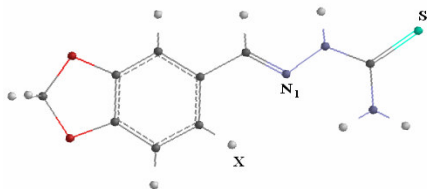


Figura 1 - Estrutura da tiossemicarbazona derivada de 3,4 – metilendioxi-benzaldeído substituída na posição 6 X.

## Resultados e Discussão

A ação dos grupos substituintes foi avaliada pela contribuição do potencial eletrostático e da energia do HOMO sobre os átomos de nitrogênio 1 e enxofre que são sítios reacionais relatados pela literatura. Os resultados obtidos estão relacionados na Tabela 1.

**Tabela 1.** Entalpia de formação, conformações *sin* e *anti* em relação a N<sub>1</sub> e S, cargas de potencial eletrostático e energia do HOMO dos estereoisômeros *E anti*, das tiossemicarbazonas substituídas na posição-6 do anel derivado do 3,4-metilenodioxibenzaldeído (Semi-empírico AM-1).

| Compostos       | $\Delta H_f$ | $\Delta H_f$ | Cargas Pot. Eletrost. |         | Densidade Elet. HOMO |       |
|-----------------|--------------|--------------|-----------------------|---------|----------------------|-------|
|                 | (Kcal/mol)   | (Kcal/mol)   | N <sub>1</sub>        | S       | N <sub>1</sub>       | S     |
| X               |              |              |                       |         |                      |       |
|                 | <i>Sin</i>   | <i>Anti</i>  |                       |         |                      |       |
| H               | 31.647       | 22.067       | -0.3752               | -0.5037 | 0.100                | 0.549 |
| NO <sub>2</sub> | 39.131       | 30.266       | -0.2767               | -0.4912 | 0.025                | 1.830 |
| NH <sub>2</sub> | 29.509       | 21.648       | -0.3120               | -0.5396 | 0.076                | 0.114 |
| OH              | -11.793      | -20.253      | -0.3001               | -0.5193 | 0.093                | 0.406 |
| Br              | 39.369       | 29.556       | -0.3411               | -0.5031 | 0.026                | 1.831 |
| CN              | 67.320       | 55.475       | -0.2759               | -0.4917 | 0.026                | 1.850 |

A contribuição desses substituintes pode ser mais bem visualizada através das Figuras 2 e 3, destacando-se a influência de grupos retiradores e doadores de elétrons sobre o potencial eletrostático e sobre a densidade de HOMO dos sítios reacionais.

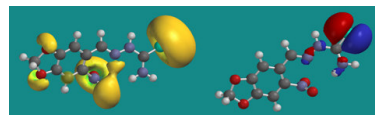


Figura 2 – Representação do potencial eletrostático (esq) e do HOMO (dir) do estereoisômero *E anti* em relação a N<sub>1</sub>-S da 6-nitro-tiossemicarbazona derivada.

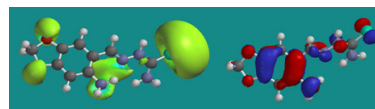


Figura 3 – Representação do potencial eletrostático (esq) e do HOMO (dir) do estereoisômero *E anti* em relação a N<sub>1</sub>-S da 6-amino-tiossemicarbazona derivada.

## Conclusões

As tiossemicarbazonas derivadas do 3,4-metilenodioxibenzaldeído apresentaram variações importantes na energia do HOMO e na carga do potencial eletrostático dos átomos de nitrogênio imínico e enxofre, com a conformação *anti* em relação a esses átomos e, na configuração *E*. Assim, observou-se que grupos substituintes retiradores de elétrons diminuem a energia do HOMO e da carga potencial sobre os sítios ativos, enquanto grupos doadores aumentam essas propriedades.

## Agradecimentos

Ao Exército Brasileiro – IME e a UFRRJ.

<sup>1</sup> Beraldo, H. *Quím. Nova*, **2004**, 27, 461.

<sup>2</sup> Karah, N.; *European Journal Medicinal Chemistry*, **2002**, 37, 909.

<sup>3</sup> Feun, L.; Modiano, M.; Lee, K.; Mao, J.; Marini, A.; Savaraj, N.; Plezia, P.; Almassian, B.; Colacino, E.; Fischer, J.; Macdonald, S.; *Cancer Chemother. Pharmacol.*, **2002**, 50, 223.

<sup>4</sup> Varughere, P.; Suni V.; Maliyeckal R. P. K. & Munirathinam N. *Polyedron*, **2004**, 23, 1225.