

## Caracterização espectroscópica de cetonas conjugadas: efeito dos substituintes sobre os espectros eletrônico e vibracional.

Patrícia R. Gomes (PG)<sup>1\*</sup>, Carlos Eduardo Silva (PG)<sup>1</sup>, Luiz Fernando C. de Oliveira (PQ)<sup>1</sup>, Marcelo S. Valle (PQ)<sup>2</sup>, Mauro V. de Almeida (PQ)<sup>1</sup>

\* patriciaramosgomes@yahoo.com.br

<sup>1</sup> Departamento de Química -ICE- Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora- MG, 36036-900.

<sup>2</sup> Instituto de Química e Biotecnologia - IQB -Universidade Federal de Alagoas, UFAL, Campus A. C. Simões, Tabuleiro do Martins – AL, 57072-970, Maceió - AL

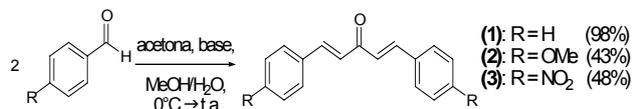
Palavras Chave: Chalconas, Infravermelho, Raman.

### Introdução

Chalconas são precursores de flavonóides nas plantas, encontrando-se amplamente distribuídas no reino vegetal e apresentando um amplo espectro de aplicações, que envolvem desde pigmentos até aplicações farmacológicas, tais como propriedades antiinflamatórias e antitumorais.<sup>1</sup> Este trabalho apresenta um estudo comparativo da estrutura eletrônica e vibracional de três chalconas: 1,5-difenilpenta-1,4-dien-3-ona (**1**), 1,5-bis(4-metóxi-fenil)penta-1,4-dien-3-ona (**2**) e 1,5-bis(4-nitrofenil)penta-1,4-dien-3-ona (**3**). O objetivo é avaliar a forma com que a substituição do hidrogênio na posição *para* por grupos doadores e receptores de elétrons afetam propriedades moleculares, tais como alto coeficiente de extinção molar e elevada deslocalização eletrônica. As técnicas de espectroscopia Raman e infravermelho foram utilizadas na tentativa de se correlacionar os aspectos eletrônicos com os da estrutura molecular.

### Resultados e Discussão

As chalconas foram sintetizadas como mostrado no esquema abaixo.



Os espectros FT-Raman foram obtidos com excitação em 1064 nm, 30 mW e 1024 acumulações. Já os espectros IV foram coletados em matriz de KBr com 512 acumulações, ambos com resolução espectral de 4 cm<sup>-1</sup>. Os espectros ópticos foram obtidos de soluções em CHCl<sub>3</sub> nas concentrações 8,5, 6,8 e 6,2 μmolL<sup>-1</sup> para os compostos **1**, **2** e **3**, respectivamente

As chalconas **1**, **2** e **3** apresentam λ<sub>máx</sub> em 327, 362 e 416 nm com absorvidades molares de 1,60x10<sup>5</sup>, 1,90x10<sup>5</sup> e 1,70x10<sup>5</sup> cm<sup>2</sup>mol<sup>-1</sup>, respectivamente. Esse deslocamento batocrômico na ordem 1>2>3 mostra que a modulação do grupo "R" perturba significativamente o sistema π conjugado. Este resultado implica em que a

diferença de energia entre os estados eletrônicos HOMO-LUMO diminui tanto no caso do grupo doador quanto do grupo retirador de elétrons. Entretanto, para o grupo -NO<sub>2</sub> este efeito tem maior magnitude, indicando haver neste caso uma deslocalização eletrônica mais efetiva.

Os espectros Raman e IV das chalconas **1** e **2** são coincidentes. Entretanto, algumas bandas ativas no Raman mostram-se inativas no espectro IV da chalcona **3**, o que pode ser entendido como um indício de uma maior simetria molecular da mesma. O modo νC=O é atribuído à banda Raman em torno de 1651 cm<sup>-1</sup> para as três chalconas; isto sugere ser este modo pouco susceptível às mudanças causadas pela substituição no grupo R. O mesmo comportamento é observado para o modo νC=C da olefina. O modo de anel 8b é atribuído tentativamente à banda em 1608 cm<sup>-1</sup> o qual é ativo em ambas as técnicas com exceção da chalcona **3**, onde é ativa apenas no IV.<sup>2</sup> O mesmo é observado para o modo 8a (1594 cm<sup>-1</sup>), mas neste caso, esta é ativa no Raman.<sup>2</sup> De uma forma diferenciada observa-se uma banda em 1574 cm<sup>-1</sup>, atribuída ao modo de anel νC=C. apresentando-se deslocada em 14 cm<sup>-1</sup>. Outro modo de anel bastante afetado é atribuído à banda em 1496 cm<sup>-1</sup> nos espectros vibracionais da chalcona **1** e 1511 cm<sup>-1</sup> para a chalcona **2** a qual encontra-se 14 cm<sup>-1</sup> deslocada para região de maior frequência no espectro IV da chalcona **3**.

### Conclusões

A estrutura eletrônica das chalconas é consideravelmente afetada pela modulação de diferentes grupos na posição *para*. Os modos vibracionais do grupo cetona e da parte olefínica são pouco afetados, diferentemente do observado para os modos de anel.

### Agradecimentos

Às agências FAPEMIG, CAPES e CNPq.

<sup>1</sup> Weber, W. M. et al. *Biochem. Pharmacol.*, **2006**, 72, 928-929.

<sup>2</sup> Sundaraganesan, N. et al. *Spectrochim. Acta Part A*, **2007**, 66, 17-27.