

Determinação de Distâncias Entre Grupos Funcionais em Moléculas Bidimensionais em Excel: A Matemática Sob um Olhar Químico

José Roberval Cândido Júnior^{1*} (IC) e Luiz Antonio Soares Romeiro² (PQ). E-mail: jjunior84@yahoo.com.br

Laboratório de Química Teórica, Universidade Federal do Ceará-CE

Laboratório de Desenvolvimento de Estratégias Terapêuticas, Universidade Católica de Brasília- DF, CEP: 71.966-700

Palavras Chave: ferramenta didática, distâncias, grupos funcionais, Excel, Spartan

Introdução

O estudo das distâncias de grupos farmacofóricos e auxofóricos em compostos bioativos é imprescindível na construção de modelos farmacofóricos para diferentes alvos terapêuticos, o qual é facilitado pelo uso de softwares comerciais como o Spartan¹. Entretanto, os altos custos relacionados às licenças institucionais têm limitado o acesso de estudantes de Química e Farmácia a estes programas. Em adição, os estudantes têm contato com estruturas no espaço bidimensional do plano do papel, o que limita os conformeros a estruturas antiperiplanar (*trans*, alternada) e sinperiplanar (*cis*, eclipsada) relacionadas a uma distribuição linear de 180° ou 0°, respectivamente. Descrevemos neste trabalho a construção de uma ferramenta no Excel baseada no auxílio matemático que compreende estruturas com conformação antiperiplanar considerando o ambiente bidimensional de materiais didáticos.

Resultados e Discussão

As estruturas de *n*-fenilalcanaminas primárias foram construídas no Spartan, cujos ângulos diedros foram fixados em 180°. Em seguida foram medidas as distâncias, considerando a amina e o centróide do anel aromático. Um plano cartesiano foi criado para a decomposição de vetores *x* e *y* quando os diedros que contêm os metilenos estão *trans*-dispostos (180°). O eixo da abscissa é aquele determinado pela reta que corta o centróide do benzeno e o primeiro metileno; e o eixo das ordenadas é aquele determinado pela reta perpendicular ao das ordenadas tendo origem no centróide (Figura 1).

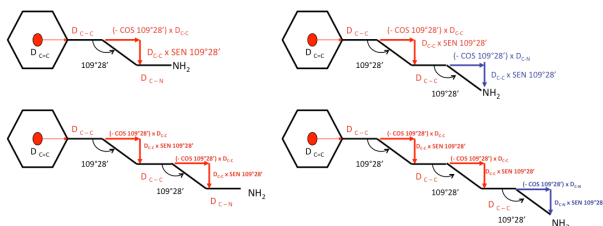


Figura 1: Diedros dispostos em conformações *trans*

Neste sentido, para um número par de metilenos a componente *x* é igual a $(NM/2) \times (\text{Comp. de ligação C-C}) - (NM/2) \times \cos(1,91) \times (\text{Comp. de ligação C-C})$

+ distância centróide + distância C-N. Já a componente *y* tem relação igual a $(NM/2) \times \sin(1,91) \times (\text{Comp. da ligação C-C})$. Considerando o número ímpar de metilenos, o CD_x será igual (Distância do centróide) + $(NM+1)/2 \times (\text{Comp. de ligação C-C}) - (NM-1)/2 \times \cos(1,91) \times (\text{Comp. de ligação C-C}) - \cos(1,91) \times (\text{Comp. de ligação C-N})$ e a distância do eixo *y* igual a $(NM-1)/2 \times \sin(1,91) \times (\text{Comp. de ligação C-C}) + \sin(1,91) \times (\text{Comp. de ligação C-N})$. Os resultados mostraram-se muito próximos aos obtidos pelo Spartan (Quadro 1).

Quadro1 – Determinação das distâncias entre átomos e centróide do anel aromático pelo Spartan e Excel

Conformação Antiperiplanar (<i>trans</i> , alternada)				
CH ₂	Excel			Spartan
	X	Y	D (pm)	D (pm)
0	287,9	0,00	287,9	288,0
1	342,9	138,6	369,9	369,4
2	491,9	144,4	512,7	512,5
3	547,0	283,0	615,8	615,4
4	696,0	288,8	753,5	753,2
5	751,0	427,4	864,1	863,7
6	900,0	433,1	998,8	998,6

Os estudantes puderam quantificar a distância entre os grupos escolhidos, dinamizando o estudo e compreensão desta propriedade na construção de modelos farmacofóricos. Permitiu ainda o desenvolvimento do tema a partir de estruturas estáticas e levou à discussões sobre análise conformacional, conformações bioativas e reconhecimento molecular bem como a apropriação significativa de linguagem específica.

Conclusões

O delineamento das fórmulas no Excel levou à distâncias na mesma faixa do Spartan. A ferramenta permitiu o estudo do tema, aumentando a capacidade de compreensão e interpretação dos estudantes, representando um facilitador no aprendizado. Esta abordagem foi incorporada à dinâmica das aulas de Química Farmacêutica I.

Agradecimentos

Os autores agradecem à UCB e a UFC pelo auxílio financeiro.

¹ Hofsløkken, N. e Skattebøl, L., Acta Chem. Scand., 1999, 53, 258-262

² Awar, H. F. *et al.*, *Tetrah. Lett.*, **2005**, *46*, 5285-5287.