

## Equações para o cálculo do índice de Kovats de n-alcenos a partir de descritores moleculares e parâmetros físico-químicos

Rafael Saugo<sup>1</sup> (PG)\*, Keller Paulo Nicolini<sup>2</sup> (PQ), Clodoaldo Machado<sup>3</sup> (PQ), Rafael Faria Giovannella<sup>1</sup> (PG), Celso Rodrigo Nicoletti<sup>1</sup> (PG) e Felipe Fernando Guedes<sup>1</sup> (PG) rsaugo@al.furb.br

1. Departamento de Química, Universidade Regional de Blumenau, FURB, Blumenau, SC, CEP 89010-971

2. Instituto Federal do Paraná, IFPR, Campus Palmas, Palmas, PR, CEP 85555-000

3. Instituto Federal de Santa Catarina, IFSC, Campus Jaraguá do Sul, Jaraguá do Sul, SC, CEP 89251-000

Palavras Chave: descritores moleculares, índice de Kovats, n-alcenos, parâmetros físico-químicos, tempo de retenção

### Introdução

A existência de propriedades físico-químicas bem definidas da matéria e suas previsões através das leis da física tem contribuído para a crescente aplicação de métodos computacionais na área da química. Este fato permite aos químicos criar modelos capazes, em uma certa extensão, de agrupar, prever e desenvolver novos materiais.<sup>1</sup> O índice de Kovats (KI) é importante na técnica de cromatografia, pois padroniza os valores do tempo de retenção para cada substância, sendo este último dependente do tempo de uso da coluna e dos eluentes utilizados.<sup>2</sup> Neste trabalho utilizamos 20 n-alcenos (Figura 1) de cadeia linear, de 6 a 25 carbonos,<sup>2</sup> com o objetivo de encontrar equações para o cálculo do KI a partir de seus descritores moleculares ou parâmetros físicos, estes determinados computacionalmente.

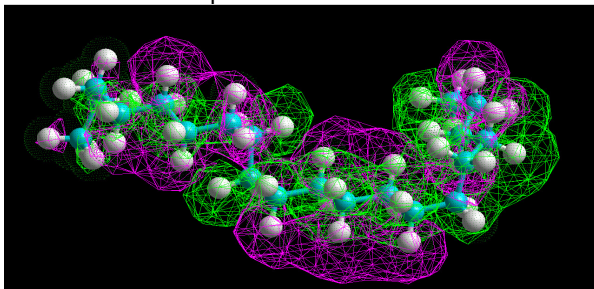


Figura 1. Estrutura de um dos alcanos: n-nona-decano (HOMO e LUMO).

### Resultados e Discussão

O procedimento metodológico MM-DM-MM foi utilizado no HyperChem<sup>®</sup> 7.5 para otimizar as estruturas dos n-alcenos. Os descritores moleculares foram calculados com o programa DRAGON, que permite calcular 1497 descritores moleculares, divididos em 18 classes.<sup>3</sup> Os parâmetros físico-químicos foram calculados diretamente no HyperChem<sup>®</sup>. A avaliação das correlações quantitativas entre as características estruturais determinadas computacionalmente e os valores do KI foi realizada no programa BuildQsar. As Equações 1 e 2 foram obtidas a partir de descritor molecular e parâmetro físico-químico, respectivamente.

$$\text{KI} = -565,56428 (\pm 0,83120) \cdot \text{X}[94] + 316,75772 (\pm 2,08890) \text{ Eq.(1)}$$

(n = 13; r<sup>2</sup> = 1,000; s = 13,523; Q<sup>2</sup> = 1,000)

$$\text{KI} = + 54,48707 (\pm 0,08250) \cdot \text{X}[20] - 42,53057 (\pm 2,66042) \text{ Eq.(2)}$$

(n = 13; r<sup>2</sup> = 1,000; s = 13,932; Q<sup>2</sup> = 1,000)

onde: **X[94]** é um descritor molecular topológico e **X[20]** é a polarizabilidade da molécula.

A validade das equações 1 e 2 foi testada utilizando-se as mesmas para o cálculo do valor de KI de sete n-alcenos, da série teste. O resíduo médio, diferença entre o valor calculado e o valor real, foi de 0,92 para a equação que emprega o descritor molecular e de 1,25 para a equação que emprega o parâmetro físico-químico.

### Conclusões

Os estudos aqui apresentados demonstram que o índice de Kovats está diretamente relacionado com a polarizabilidade dos n-alcenos, podendo ser determinada também a partir de um descritor molecular topológico. As equações obtidas apresentaram excelente capacidade de predição do valor do KI, podendo ser empregadas no cálculo deste parâmetro. Estudos posteriores serão realizados a fim de verificar se as equações obtidas tem validade na determinação dos valores do KI para alcanos de cadeia não linear e mesmo compostos contendo outros grupos funcionais.

### Agradecimentos

A FURB, ao IFPR, ao IFSC e a CAPES.

<sup>1</sup> Dos Santos, H. F. *Cad. Tem. de QNEsc*, 4, 4, 2001.

<sup>2</sup> Adams, R. P. Identification of Essential 'oil Components by Gas Chromatography/Mass Spectrometry. 2007.

<sup>3</sup> Saugo, R; Nicolini, K.P. **Estudo do Rf de 20 flavonóides em função de seus descritores moleculares.** 14<sup>o</sup> Encontro de Química da Região Sul, Erechim, 2006.