

# XXI Semana de Iniciação Científica da URCA

05 a 09 de novembro de 2018  
Universidade Regional do Cariri

## Investigação das propriedades estruturais e espectroscópicas das chalconas sintéticas (1E, 4E)-1,5-difenilpenta-1,4-dien-3-ona e (1E, 3E, 6E, 8E)-1,9-difenilona-1,3,6,8-tetraen-5-ona.

Filipe Dantas de Sousa<sup>1</sup>, Hélcio Silva dos Santos<sup>2</sup>, Igor Kleber Campos Lima<sup>3</sup>, Alexandre Magno Rodrigues Teixeira<sup>4</sup>.

**Resumo:** As chalconas são substâncias naturais ou sintéticas que possuem em suas estruturas dois anéis aromáticos unidos por um sistema de cetona  $\alpha$ ,  $\beta$ -insaturado. Essa classe de substância apresenta um longo espectro de atividades biológicas: atividade anticâncer, antioxidante, anti-Hiv, antituberculosa, antimicrobiana, anti-inflamatório, antimalárica, antifúngico e anticonvulsivante. Esta classe de material orgânico também tem despertado muito interesse devido as suas propriedades ópticas não lineares que possuem potencial aplicação tecnológica. Neste contexto, duas chalconas sintéticas (1E, 4E)-1,5-difenilpenta-1,4-dien-3-ona e (1E, 3E, 6E, 8E)-1,9-difenilona-1, 3, 6, 8-tetraen-5-ona obtidas por condensação aldólica de Claisen Schimdt foram caracterizadas pela técnica de espectroscopia infravermelho e cálculos de química quântica. Neste trabalho amostras policristalinas de duas chalconas sintéticas: 1E, 4E) 1,5\_difenilpenta\_1, 4\_dien\_3\_ona ( $C_{21}H_{18}O$ ) e (1E, 3E, 6E, 8E)\_1,9\_difenilona\_1,3,6,8\_tetraen\_5\_ona ( $C_{17}H_{14}O$ ) foram caracterizadas usando o espectrômetro VERTEX 70v, da marca BRUKER e a técnica de Infravermelho com Transformada de Fourier por Refletância Total Atenuada (FTIR\_ATR). A análise vibracional do espectro de absorbância FTIR\_ATR dessas chalconas foi feita usando o programa *Gaussian* 09 empregando o método da teoria do funcional da densidade (DFT) com o funcional de correlação Lee-Yang-Parr, B3LYP e o conjunto com a série de base 6-31 G (d,p). As bandas espectrais das chalconas sintéticas foram identificadas e suas intensidades foram normalizadas em um intervalo [0-100]. Foram observadas 30 bandas para a chalcona  $C_{21}H_{18}O$  sendo três muito fracas três fracas, duas médias, dez fortes e doze muito fortes e 43 bandas para chalcona  $C_{17}H_{14}O$  sendo quinze muito fracas duas fracas, seis médias, oito fortes e doze muito fortes. Os espectros FTIR-ATR nos permite afirmar que há bandas características de grupos funcionais específicos em determinadas regiões dos espectros para cada uma das chalconas sintéticas estudadas neste trabalho.

**Palavras-chave:** Cálculos DFT. Chalconas. Infravermelho.

<sup>1</sup> Universidade Regional do Cariri, e-mail: [blackmetaldantas@gmail.com](mailto:blackmetaldantas@gmail.com)

<sup>2</sup> Universidade Estadual Vale do Acaraú, email: [helciodossantos@gmail.com](mailto:helciodossantos@gmail.com)

<sup>3</sup> Universidade Regional do Cariri, e-mail: [igor16kleber@gmail.com](mailto:igor16kleber@gmail.com)

<sup>4</sup> Universidade Regional do Cariri, e-mail: [alexandre.teixeira@urca.br](mailto:alexandre.teixeira@urca.br)