

ESTUDO TEÓRICO E ESTRUTURAL DE UM NOVO DERIVADO DE CHALCONA: EXPLORANDO APLICAÇÕES ÓPTICAS NÃO LINEARES EM MEIO SOLVENTE.

Paulo Sérgio Alves da Silva, Graduando em Licenciatura em Física, UEG/CET, paulo@aluno.ueg.br
Renato Medeiros, Doutor, UEG/CET, renato.medeiros@ueg.br

Resumo: Este trabalho explora as propriedades eletro-ópticas de uma chalcona derivada de carbazol por meio de cálculos teóricos, utilizando softwares de química computacional como GaussView, Chemcraft e Mercury. A investigação foca na otimização geométrica e análise espectroscópica (UV-Vis e IR) utilizando métodos como Hartree-Fock e DFT, variando funcionais e funções de base. Além de analisar o impacto do número de processadores e estados excitados no tempo de execução, o estudo busca desenvolver uma apostila didática para capacitar pesquisadores no uso dessas ferramentas. Os resultados demonstram a importância da paralelização e escolha eficiente de parâmetros para cálculos precisos.

Palavras-chave: Chalcona, Cálculos computacionais, Teoria do funcional da densidade (DFT).

INTRODUÇÃO

As chalconas são compostos orgânicos caracterizados por dois anéis aromáticos conectados por uma carbonila α,β -insaturada. Essa classe de compostos tem atraído atenção devido ao seu potencial em áreas biológicas e farmacológicas, como propriedades anti-inflamatórias e anticancerígenas (SINGH; ANAND; KUMAR, 2014). Além disso, aplicações em óptica não linear destacam sua relevância para o desenvolvimento de novas tecnologias (RAMKUMAR et al., 2013; ZHAO et al., 2000). Neste estudo, abordamos a estrutura cristalina (E)-3-[4-(9,9a-dihydro-8aHcarbazol-9-yl)phenyl]-1-(4-nitrophenyl)prop-2-en-1-one (CPNC), ilustrada na Figura 1, para os cálculos e simulações computacionais.

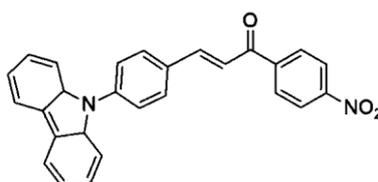


Figura 1 – Fórmula estrutural do composto a ser estudado.

As simulações computacionais são ferramentas essenciais para o estudo de propriedades geométricas, eletrônicas e energéticas de moléculas, integrando teoria e prática (LEITE, 2019). Neste trabalho, diversos softwares especializados foram empregados para análises específicas relacionadas às chalconas.

Este estudo tem como objetivo principal investigar as propriedades eletro-ópticas de uma chalcona derivada de carbazol por meio de simulações computacionais, avaliando a influência de parâmetros como o número de processadores e a quantidade de estados excitados na eficiência e precisão dos cálculos. Como produto final, busca-se elaborar uma apostila didática, servindo como material de apoio e orientação para futuras aplicações em química computacional.

MATERIAIS E MÉTODOS

O projeto tem como objetivo capacitar e elaborar uma apostila para discentes iniciantes de pesquisa teórica, com foco no cálculo de propriedades eletro-ópticas computacionais. A proposta visa formar pesquisadores autônomos, aptos a utilizar ferramentas de modelagem molecular para a resolução de problemas relacionados à química quântica, alinhados às linhas de investigação desenvolvidas no Grupo de Química Teórica e Estrutural Aplicada (GQTEA - UEG).

Inicialmente, o foco principal do projeto consiste na familiarização com softwares especializados, essenciais para a execução de cálculos teóricos e simulações computacionais. O Origin foi utilizado para a visualização e análise de dados espectroscópicos, como UV-Vis e IR. O Chemcraft permitiu a visualização de orbitais moleculares e a análise de propriedades eletrônicas. Já o GaussView foi aplicado para otimização geométrica e cálculo de espectros vibracionais da molécula. O Mercury contribuiu na análise de estruturas cristalinas e interações intermoleculares, enquanto o Multifwn foi empregado para a análise de espectros vibracionais.

Os cálculos deste trabalho foram conduzidos utilizando o Método Hartree-Fock (HF) e a Teoria do Funcional da Densidade (DFT), sendo conduzidos com diferentes funcionais e funções de base. A função de base 6-311++G(d,p) foi escolhida por sua capacidade de fornecer uma descrição detalhada da densidade eletrônica. A aug-cc-pVDZ foi utilizada para melhorar a modelagem de transições eletrônicas, enquanto a Def2TZVP foi empregada para cálculos de alta precisão.

A apostila está sendo desenvolvida com foco no ensino prático dos softwares abordados, visando capacitar pesquisadores autônomos no manuseio dessas ferramentas para cálculos e simulações. A estrutura aborda, de forma gradual, a instalação, configuração e utilização de cada software, com exemplos baseados nas atividades realizadas no projeto, permitindo que os discentes se tornem autônomos na resolução de problemas relacionados à química quântica. Serão exploradas as funcionalidades e aplicações dessas ferramentas, permitindo a realização de experimentos computacionais iniciais e a obtenção de dados que possam ser correlacionados com os fundamentos teóricos da química quântica. Essa abordagem busca não apenas o domínio técnico das ferramentas, mas também a integração dos resultados obtidos com o conhecimento teórico e experimental.

RESULTADOS

As análises de IR e UV-Vis foram realizadas utilizando os softwares Origin e Multifwn, com os resultados apresentados nas Figuras 2 e 3.

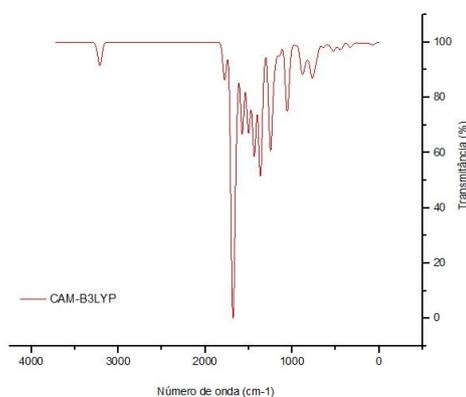


Figura 2 – Gráfico de transmitância (IR) da estrutura.

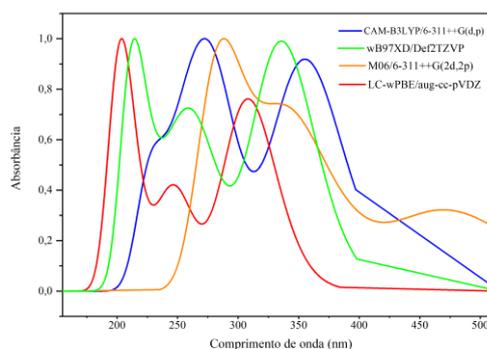


Figura 3 – Gráfico de absorbância da estrutura em variação da função base.

Os cálculos foram realizados utilizando o funcional CAM-B3LYP, que combina a correção de longo alcance com a Teoria do Funcional da Densidade (DFT), sendo adequado para estudos de

propriedades eletro-ópticas (SOARES, et al., 2020). Para avaliar a eficiência computacional, variou-se o número de processadores (1, 2 e 4) e o número de estados excitados (10, 15 e 20). O tempo computacional diminuiu de 1821 minutos (1 processador) para 968 minutos (2 processadores), atingindo 243 minutos com 4 processadores, indicando um ganho de eficiência significativo. A variação no número de processadores (1, 2 e 4) não alterou os resultados dos espectros de UV-Vis.

A variação no número de estados excitados demonstrou um impacto significativo tanto no tempo de execução quanto nos espectros de UV-Vis. O número de estados excitados revelou um aumento no tempo de execução: 794 minutos (10 estados), 800 minutos (15 estados) e 1090 minutos (20 estados). Em relação aos espectros de UV-Vis, observou-se que cálculos com poucos estados excitados não capturaram todas as transições eletrônicas relevantes, enquanto cálculos com 20 ou mais estados excitados apresentaram espectros estáveis e consistentes.

Esses resultados serão incorporados à apostila como um guia para a configuração eficiente de cálculos teóricos, auxiliando na escolha de parâmetros computacionais adequados. A apostila está sendo elaborada com base nos resultados obtidos e nas práticas realizadas.

DISCUSSÃO

Os resultados obtidos neste estudo permitiram uma análise detalhada das propriedades eletro-ópticas da chalcona, bem como uma avaliação do desempenho computacional das metodologias empregadas. As análises de IR e UV-Vis, conduzidas com o auxílio dos softwares Origin e Multifwn, revelaram padrões espectroscópicos consistentes com dados reportados na literatura (MEDVEDEV; BUSHMARINOV; SUN, 2017). Esses resultados destacam a importância das interações intermoleculares na modulação das propriedades ópticas, reforçando a necessidade de simulações precisas para o estudo de propriedades ópticas não lineares. Esses dados serão integrados à apostila como exemplos práticos, ilustrando a correlação entre dados teóricos e experimentais. Além dos espectros de UV-Vis, as análises de IR forneceram informações valiosas sobre os modos vibracionais da molécula estudada. O espectro de IR apresentou bandas de absorção características em regiões específicas, conforme observado na Figura 2.

A variação no número de processadores demonstrou um impacto significativo na eficiência dos cálculos. O tempo de execução reduziu-se de 1821 minutos (1 processador) para 243 minutos (4 processadores), evidenciando a importância da paralelização para otimizar recursos computacionais (PAVEL KROMER, 2013). Tal variação não alterou os resultados dos espectros de UV-Vis. No entanto, o tempo de execução dos cálculos foi significativamente reduzido à medida que mais processadores foram utilizados.

Em relação ao número de estados excitados, observou-se que o tempo de execução aumentou de 794 minutos (10 estados) para 1090 minutos (20 estados). Esses resultados destacam a necessidade de equilibrar precisão e custo computacional ao configurar os parâmetros para simulações teóricas. Os dados analisados serão incorporados à apostila elaborada ao fim deste trabalho, auxiliando na configuração eficiente de cálculos e na interpretação de resultados.

O desenvolvimento da apostila de práticas em química computacional representa uma contribuição significativa deste trabalho, consolidando o conhecimento adquirido em um material didático estruturado e acessível. A apostila aborda desde a instalação e configuração dos softwares até a interpretação de dados complexos, como os espectros de IR e UV-Vis gerados neste estudo. Cada seção inclui exemplos práticos, tutoriais passo a passo e exercícios que reforçam o aprendizado, permitindo que o avanço de forma gradual e autônoma. Além disso, a apostila integra recomendações baseadas nos resultados de desempenho computacional, auxiliando os usuários na escolha de parâmetros adequados para as simulações.

CONCLUSÕES

Este estudo destacou a importância da otimização de parâmetros computacionais, como o número de processadores e estados excitados, para cálculos eficientes e precisos das propriedades eletro-ópticas de chalconas. A escolha adequada desses parâmetros reduziu o tempo de execução, sem comprometer a precisão dos espectros UV-Vis. Além disso, o trabalho continua em desenvolvimento, com a criação de uma apostila didática para práticas em química computacional. Futuras etapas incluirão a simulação de efeitos de solventes.

REFERÊNCIAS

- LEITE, Bruno Silva. Tecnologias no ensino de química: passado, presente e futuro. *Scientia Naturalis*, Acre, v. 1, n. 3, 2019.
- MEDVEDEV, M. G.; BUSHMARINOV, I. S.; SUN, J. Density functional theory is straying from the path toward the exact functional. 2017.
- PAVEL KROMER, J. P. V. S. *Parallel Differential Evolution in Unified Parallel C*. [S.l.]: IEEE, 2013.
- RAMKUMAR, V.; ANANDHI, S.; KANNAN, P.; GOPALAKRISHNAN, R. Synthesis, single crystal growth, characterization and comparison of two new enone shifted chalcones and their nlo behaviour. *CrystEngComm*, Royal Society of Chemistry, v. 15, n. 13, p. 2438–2449, 2013.
- SINGH, P.; ANAND, A.; KUMAR, V. Recent developments in biological activities of chalcones: A mini review. *European journal of medicinal chemistry*, Elsevier, v. 85, p. 758–777, 2014.
- SOARES, João Victor B. et al. Theoretical study of solvent effects on the hyperpolarizabilities of two chalcone derivatives. *Rev.Colomb.Quim.*, Bogotá, v. 49, n. 1, p. 33–39, Apr. 2020.