

## Influência das Propriedades Dielétricas de Solventes nas Características Estruturais e Ópticas da Molécula HPMP

*Influence of the Dielectric Properties of Solvents on the Structural and Optical Characteristics of the HPMP Molecule*

Poliana M. Silva, Daphne C. Fernandes, João V. B. Soares, Jhenyfer C. de Castro, Euripedes M. de O. Junior & Clodoaldo Valverde

A interação entre as moléculas de solvente e soluto pode alterar a estrutura molecular e as propriedades ópticas do meio. Este estudo analisa as propriedades geométricas e elétricas de um derivado de chalcona, 1-{4-hydroxy-3-[(pyrrolidin-1yl)methyl]phenyl}-3phenylprop-2-en-1-one (HPMP), usando dados de cristalografia de raios-x. Para as propriedades geométricas, nove solventes foram examinados com um modelo de solvatação contínua polarizável, aplicando o funcional B3LYP e o conjunto de base 6-311++G(d,p) no programa Mercury 3.9, visando determinar valores de distâncias máximas, dimensões de ligações, ângulos diedrais e desvio quadrático médio. As propriedades elétricas, como o momento de dipolo e a polarizabilidade, foram calculadas usando métodos quânticos *ab initio*.

**Palavras-chave:** *chalcona; máxima distância; RMSD.*

The interaction between solvent and solute molecules can modify the molecular structure and optical properties of the medium. This study examines the geometric and electrical properties of a chalcone derivative, 1-{4-hydroxy-3-[(pyrrolidin-1yl)methyl]phenyl}-3phenylprop-2-en-1-one (HPMP), utilizing X-ray crystallography data. For geometric properties, nine solvents were investigated using a polarizable continuum solvation model, employing the B3LYP functional and the 6-311++G(d,p) basis set in the Mercury 3.9 program to determine maximum distance values, bond dimensions, dihedral angles, and root mean square deviation. Electrical properties, such as dipole moment and polarizability, were computed using *ab initio* quantum methods.

**Keywords:** *chalcone; maximum distance; RMSD*

## Introdução

Os derivados de chalcona são dotados de inúmeras informações no campo da pesquisa científica. Além disso, nos últimos anos suscitou-se grande interesse dos pesquisadores e, a razão para tal reconhecimento é dada pela sua aplicação em fotônica e suas diversas atividades biológicas, tais como: antibacterianas, antifúngicas, antiviral e anti-inflamatória, além de sua fácil modelagem<sup>1</sup>. A chalcona apresenta pigmentação amarelada<sup>2</sup> e é precursora de flavanóides encontrado em vegetais<sup>3</sup>, inseridos ao organismo humano através da alimentação<sup>4</sup>. Elas são cetonas  $\alpha$ ,  $\beta$ -insaturadas ligadas a grupamentos aromáticos<sup>5</sup>, que são comumente sintetizadas via condensação de Claisen Schmidt ou de forma natural<sup>6</sup>. Apresentam também agentes medicinais com maior potência e menor toxicidade. Moléculas orgânicas também vêm chamando a atenção, no campo da óptica, tais compostos ganharam destaque graças a fácil obtenção manipulação<sup>7</sup> e por, apresentarem efeitos solventes significantes sobre as propriedades elétricas dessas estruturas de chalconas em solução.

Os solventes são classificados como polares e apolares, uma distinção baseada principalmente em suas propriedades físico-químicas, como a capacidade de formar ligações de hidrogênio e suas constantes dielétricas, e não apenas pela eletronegatividade de átomos individuais em suas moléculas.<sup>9</sup>. Átomos com maior eletronegatividade tendem a atrair mais fortemente a nuvem eletrônica em uma ligação covalente, resultando em uma carga parcial negativa sobre eles. Por outro lado, os átomos com menor eletronegatividade ficam com uma carga parcial positiva. Essa distribuição desigual de carga leva à polarização das ligações covalentes e influencia a interação da molécula com o meio.

Quando a diferença de eletronegatividade entre dois átomos é maior que 0,5, geralmente resulta em uma ligação covalente polar, onde os elétrons são compartilhados de forma desigual. Se a diferença for menor que 0,5, a ligação é tipicamente covalente não polar, com um compartilhamento de elétrons relativamente igual. Entretanto, se a diferença de eletronegatividade exceder 1,7, a ligação tende a ser iônica,

na qual a eletronegatividade mais alta do átomo resulta na atração de elétrons suficiente para efetuar a transferência de elétrons, formando íons positivos e negativos<sup>9</sup>. Os solventes polares são divididos em próticos e apróticos<sup>10</sup>. Os solventes polares próticos são capazes de doar prótons, geralmente têm hidrogênios ligados a átomos eletronegativos, como oxigênio ou nitrogênio, e possuem uma constante dielétrica alta; a água e os álcoois são exemplos típicos. Os solventes polares apróticos, embora também tenham uma constante dielétrica alta, não podem doar prótons e não formam ligações de hidrogênio fortes. Em contraste, os solventes apolares têm uma constante dielétrica geralmente menor que 5, refletindo sua baixa capacidade de polarizar<sup>11</sup>.

Chalconas são compostas por sistemas conjugados de ligações  $\pi$ , alternando ligações simples e duplas, permitindo que os elétrons mais externos ocupem orbitais moleculares do tipo  $\pi$ . Esses elétrons deslocalizados conferem mobilidade ressonante ao longo da estrutura, o que pode influenciar propriedades ópticas da molécula. Um exemplo de tais propriedades é a refração, um fenômeno que altera a velocidade e o caminho da luz ao atravessar o meio, mantendo sua frequência constante. A intensidade do campo elétrico incidente não altera o princípio da refração, mas a polarização do soluto induzida por campos de baixa intensidade pode afetar a polarizabilidade do meio, influenciando a constante dielétrica, o momento de dipolo e a polarização eletrônica, e conseqüentemente, as características ópticas do meio.

Portanto, este trabalho visa investigar as propriedades ópticas lineares da chalcona 1-{4-hydroxy-3-[(pyrrolidin-1-yl)methyl]phenyl}-3-phenylprop-2-en-1-one (HPMP) com a fórmula estrutural C<sub>20</sub>H<sub>21</sub>NO<sub>2</sub>. O estudo avaliará as alterações na densidade eletrônica decorrentes das interações eletrostáticas em nove diferentes ambientes químicos de solventes. Além disso, os efeitos dos solventes sobre as propriedades geométricas, incluindo distâncias interatômicas e ângulos, assim como ângulos diedrais, serão estudados usando o modelo de solvatação implícito (IEF-PCM - *Polarizable Continuum Model*), aplicando a teoria funcional da densidade (DFT) com o funcional B3LYP e o conjunto de base 6-311++G(d,p).

Em sistemas moleculares soluto/solvente, alterações na densidade eletrônica podem causar variações nos parâmetros geométricos do soluto, como distâncias interatômicas e ângulos, levando a mudanças nas respostas ópticas lineares, tais como a polarizabilidade e o momento de dipolo, quando o soluto está imerso no solvente.

Para simular os efeitos de solventes implícitos, são empregadas duas técnicas principais. A primeira trata o par soluto/solvente como uma supermolécula, analisando as interações microscópicas com o menor número possível de moléculas de solvente. Esta abordagem permite uma análise detalhada, mas com custos computacionais significativos. A segunda técnica substitui o meio real por um contínuo dielétrico, simplificando as interações macroscópicas e permitindo uma variedade de cálculos, como otimização de geometria em solução, análise dos efeitos solventes e estudo de reações químicas.

Com base no que foi exposto, o presente estudo utiliza nove solventes diferentes para investigar a molécula de Chalcona HPMP, focando na análise comparativa dos resultados e empregando o meio dielétrico contínuo, isto é, a segunda técnica de simulação. Os solventes selecionados incluem argônio (um solvente apolar), clorofórmio, tetra-hidrofurano (THF), acetona, etanol, metanol, água e a mistura de N-metilformamida, cada um com suas respectivas constantes dielétricas, classificando-os como polares ou apolares. Posteriormente, sobrepondo o cristal e a molécula otimizada, calculamos as distâncias atômicas, o desvio médio quadrático (RMSD), o tamanho das ligações e os ângulos de torção. Finalmente, correlacionamos as polarizabilidades lineares com cada um dos nove solventes. O objetivo é compreender qual ou quais solventes exercem maior efeito sobre as constantes dielétricas por meio da solvatação contínua (IEF-PCM), fornecendo insights valiosos sobre a estrutura geométrica e o comportamento óptico linear da molécula.

## Metodologia

Após selecionar os nove solventes conforme descrito na literatura, as variações dos resultados foram calculadas

e avaliadas usando métodos apropriados para investigar as propriedades físicas de interesse.

### DESVIO MÉDIO QUADRÁTICO

O RMSD (Root Mean Square Deviation) é uma métrica que mede a média das distâncias quadráticas entre átomos correspondentes em duas estruturas. Ele fornece uma indicação da estabilidade estrutural comparando as diferenças de posição (coordenadas x, y, z) entre os átomos das duas estruturas. Um ponto de referência, geralmente alguns átomos selecionados do sistema, é usado para alinhar as estruturas antes do cálculo do RMSD. Valores elevados de RMSD indicam uma grande discrepância entre as conformações estruturais, sugerindo que não há equilíbrio geométrico entre elas. Assim, altos valores de RMSD podem refletir uma distorção significativa na dinâmica molecular devido a interações intermoleculares que desviam das conformações esperadas ou ideais<sup>14</sup>.

### DISTÂNCIA ATÔMICA

As forças de interação entre moléculas e átomos são primordialmente elétricas e estão diretamente relacionadas com as propriedades termodinâmicas e a proximidade entre moléculas. Estas interações variam conforme a distância entre duas moléculas: as de longo alcance operam em grandes distâncias, enquanto as de curto alcance se manifestam quando as moléculas estão mais próximas. A força de atração, que contribui para a formação de ligações e a agregação de átomos, e a força de repulsão, que impede a sobreposição das nuvens eletrônicas, atuam concomitantemente e são influenciadas pela distância intermolecular. O ponto de equilíbrio entre essas forças ocorre na distância onde a energia potencial do sistema é minimizada e a força resultante entre as moléculas é nula, reduzindo a capacidade de atrair ou repelir elétrons adicionalmente.

### MOMENTO DE DIPOLO

Ao posicionar uma molécula dentro de uma cavidade modelada por um meio dielétrico, cria-se um campo de reação cíclica devido à polarização do próprio dielétrico,

que é influenciada pela distribuição de cargas da molécula inserida. No contexto dos sistemas moleculares, as forças de Van der Waals, que emergem entre átomos e moléculas, têm origem quântica. Elas são resultado das flutuações temporárias na densidade eletrônica, que geram dipolos momentâneos nos átomos ou moléculas. Esses dipolos instantâneos, por sua vez, podem induzir dipolos correspondentes em átomos ou moléculas adjacentes. A interação entre esses dipolos induzidos resulta em uma atração entre as partículas, levando a uma diminuição na energia potencial do sistema. O momento de dipolo total do sistema é, portanto, a soma vetorial de todos os dipolos instantâneos e induzidos no sistema e pode ser escrito na seguinte forma:

$$\mu = (\mu_x^2 + \mu_y^2 + \mu_z^2)^{\frac{1}{2}}. \quad (1)$$

### POLARIZABILIDADE LINEAR

A polarizabilidade de uma molécula está intrinsecamente ligada às suas características estruturais e eletrônicas. Essa propriedade quantifica a distorção da nuvem eletrônica da molécula em resposta a um campo elétrico aplicado, seja ele constante ou variável no tempo. Em termos mais simples, ela se refere ao grau em que os momentos de dipolo se alinham e causam uma alteração na distribuição eletrônica da molécula em resposta ao campo elétrico.

Quando a polarizabilidade linear é baixa, sugere-se que a distribuição eletrônica é mais simétrica, resultando em uma estrutura molecular mais compacta e menos suscetível a distorções. Por outro lado, uma alta polarizabilidade linear indica uma maior assimetria eletrônica, com uma estrutura molecular mais aberta e flexível. Existe uma relação direta entre a intensidade do campo elétrico aplicado, o momento de dipolo induzido e a polarizabilidade linear da molécula.

A polarização média em um sistema soluto/solvente é diretamente proporcional à polarizabilidade das moléculas envolvidas. As propriedades de polarizabilidade, representadas pela letra grega  $\alpha$ , podem ser expressas por:

$$\langle \alpha \rangle = \frac{\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz}}{3}. \quad (2)$$

### ÂNGULOS DIEDRAIS

Através da geometria molecular, é possível determinar a distribuição espacial dos elétrons e dos núcleos atômicos na molécula, assim como a polaridade desta. Os ângulos diedrais são definidos pela rotação em torno de uma ligação entre dois átomos, limitados por quatro átomos em sequência, fornecendo uma perspectiva tridimensional da forma molecular. Estes ângulos podem indicar a simetria da molécula e são importantes para compreender as interações eletrônicas e os níveis de energia.

Conforme a teoria de repulsão dos pares de elétrons da camada de valência, pares de elétrons de valência, sejam eles ligantes ou não ligantes, comportam-se como nuvens eletrônicas. Eles tendem a se afastar uns dos outros, buscando minimizar a repulsão mútua e estabilizar a molécula com a menor energia possível. No entanto, perturbações no ambiente, como a presença de outros campos elétricos ou interações intermoleculares, podem alterar a configuração dos ângulos diedrais, influenciando assim os níveis de energia, as interações eletrônicas e a polaridade da molécula.

### DADOS CRISTALOGRAFICOS

Com relação aos dados cristalográficos, o composto HPMP possui a fórmula estrutural  $C_{20}H_{21}NO_2$  e cristaliza-se no sistema ortorrômbico, especificamente no grupo espacial  $P2_12_12_1$ , que é centrossimétrico. A célula unitária contém 4 moléculas, com os parâmetros cristalográficos principais:  $a = 5.8403 (5) \text{ \AA}$ ,  $b = 16.3195 (13) \text{ \AA}$ ,  $c = 17.3615 (14) \text{ \AA}$  e um volume de célula de  $1654.7 (2) \text{ \AA}^3$ . A Figura 1 ilustra a molécula do HPMP e auxilia na identificação da posição dos átomos de carbono, oxigênio e nitrogênio dentro da estrutura. Esses detalhes são cruciais para entender a disposição tridimensional dos átomos e as interações intermoleculares que ocorrem no estado sólido.

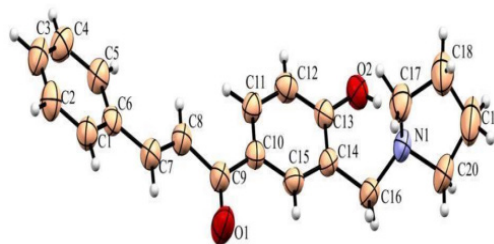


Figura 1. Molécula HPMP.

## Resultados

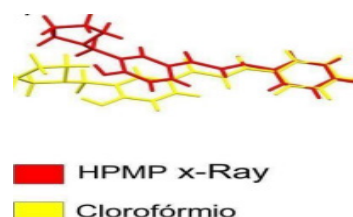
A seguir, apresentamos os resultados obtidos e discutimos sua relevância com base nas referências bibliográficas e na análise da sobreposição da estrutura cristalina com os nove solventes estudados. Esta análise revela que os solventes influenciam tanto a velocidade da reação quanto o produto final, de acordo com o número 13 em nossas referências. Foram analisados nove solventes, dos quais os valores obtidos estão detalhados na relação que contempla suas constantes dielétricas e classificações em termos de polaridade. A correlação entre a constante dielétrica do solvente e as variações observadas na molécula HPMP, em comparação com a molécula otimizada, é crucial para compreender as diferenças nos parâmetros de distância máxima e RMSD. Estes parâmetros foram modelados usando o método de solvatação contínua IEF-PCM.

Na **Tabela 1**, listamos os nove solventes selecionados, juntamente com suas respectivas constantes dielétricas, distâncias máximas, valores de RMSD e a classificação de cada um como polar ou apolar.

**Tabela 1.** Parâmetros do meio solvente: Constante dielétrica estática ( $\epsilon$ ), classificação como prótico, aprótico ou apolar e resultados obtidos de RSMD e máxima distância através da sobreposição da molécula do cristal com a molécula otimizada.

Solvente	( $\epsilon$ )	Classificação	RSMD	Máxima Distância
Argônio	1,43	Apolar/Aprótico	0,54	1,01
Clorofórmio	4,71	Apolar/Aprótico	0,55	1,00
Tetra HydroFuran	7,43	Apolar/Aprótico	0,55	0,99
Acetona	20,49	Apolar/Aprótico	0,54	0,98
Etanol	24,85	Polar/Prótico	0,54	0,98
Metanol	32,61	Polar/Prótico	0,54	0,97
DMSO	46,83	Apolar/Aprótico	0,54	0,97
Água	78,36	Polar/Prótico	0,54	0,97
Mistura de n-metilformamida	181,56	Polar/Prótico	0,54	0,96

Dentre os solventes analisados na Tabela 1, o clorofórmio (CHCl<sub>3</sub>) apresentou o maior desvio médio quadrático (RMSD), conforme indicado na referência 14. Um RMSD elevado indica uma grande discrepância entre a estrutura da molécula no estado cristalino e sua forma otimizada no solvente; isto é, no clorofórmio, a molécula exibe pouca semelhança estrutural em comparação à sua configuração cristalina. Essa variação é atribuída à interação entre o soluto e o solvente, influenciada pelo potencial dielétrico do solvente, que facilita as interações intermoleculares, como citado na referência 1. Consequentemente, a baixa estabilidade e equilíbrio estrutural observados no clorofórmio podem impactar as propriedades ópticas do soluto de maneira distinta em relação aos outros solventes estudados.



**Figura 2.** Resultado da sobreposição, valores de maior RMSD.

Na Tabela 2, estão listadas as medidas do tamanho de algumas ligações químicas. Ao analisar o comprimento das ligações O<sub>1</sub>-C<sub>9</sub>, N<sub>1</sub>-C<sub>16</sub>, O<sub>2</sub>-H<sub>10</sub> e C<sub>9</sub>-C<sub>10</sub>, observa-se que não houve variações significativas. Portanto, essas ligações não apresentam alterações expressivas que impactem as propriedades de interesse no estudo.

**Tabela 2.** Tamanho das ligações em Angstrom.

Solvente	( $\epsilon$ )	O <sub>1</sub> -C <sub>9</sub>	N <sub>1</sub> -C <sub>16</sub>	O <sub>2</sub> -H <sub>10</sub>	C <sub>9</sub> -C <sub>10</sub>
Argônio	1,43	1,23	1,47	0,99	1,49
Clorofórmio	4,71	1,23	1,47	1,00	1,49
TetraHydroFuran	7,43	1,23	1,47	1,00	1,49
Acetona	20,49	1,23	1,47	1,01	1,49
Etanol	24,85	1,23	1,47	1,01	1,49
Metanol	32,61	1,23	1,47	1,01	1,49
DMSO	46,83	1,23	1,47	1,01	1,49
Água	78,36	1,23	1,47	1,01	1,49
Mistura de n-metilformamida	181,56	1,24	1,47	1,01	1,49

Os dados da Tabela 3 mostram a relação entre a constante dielétrica dos solventes ( $\epsilon$ ) e o ângulo das ligações químicas. Observa-se que há uma tendência de diminuição do ângulo de ligação à medida que a constante dielétrica do solvente aumenta. Especificamente, a ligação  $C_{13}-O_2-H_{10}$  se destacou por apresentar a maior distância atômica entre as analisadas, indicando que os pares de elétrons nessa ligação tendem a se repelir mais fortemente, buscando uma configuração mais estável do ponto de vista da geometria estrutural.

**Tabela 3.** Valores dos ângulos em graus.

Solvente	( $\epsilon$ )	$C_{13}-O_2-H_{10}$	$C_6-C_7-C_8$	$N_1-C_{16}-C_{14}$	$C_{10}-C_{15}-H_{15}$
Argônio	1,43	106,67	127,95	112,75	117,72
Clorofórmio	4,71	106,36	127,88	112,53	117,98
TetraHydroFuran	7,43	106,30	127,86	112,48	118,04
Acetona	20,49	106,23	127,83	112,42	118,11
Etanol	24,85	106,22	127,83	112,41	118,12
Metanol	32,61	106,21	127,82	112,40	118,13
DMSO	46,83	106,21	127,82	112,40	118,14
Água	78,36	106,20	127,82	112,39	118,15
Mistura de n-metilformamida	181,56	106,19	127,81	112,39	118,15

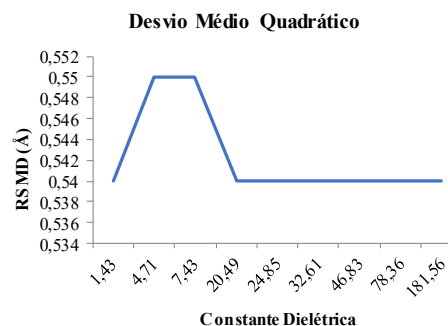
A Tabela 4 foca na análise da torção estrutural da molécula quando exposta a nove diferentes solventes. Considerando que os momentos de dipolo são grandezas vetoriais, a configuração tridimensional da molécula e os ângulos de torção são cruciais na determinação das distribuições de carga e, conseqüentemente, no momento de dipolo resultante. Isso explica por que, em certos casos, uma molécula com ligações polares pode ter um momento de dipolo total nulo: os dipolos individuais podem se anular devido à geometria molecular, especificamente por causa dos ângulos diédricos ou de torção.

Observou-se que o ângulo diédrico, ou de torção, varia em função da constante dielétrica do solvente. A análise dos dados na Tabela 4 indica que uma maior constante dielétrica ( $\epsilon$ ) está associada a uma maior discrepância na influência dos solventes sobre a torção da estrutura molecular.

**Tabela 4.** Ângulos diédricos ou Torção.

Solvente	( $\epsilon$ )	$C_{16}-N_1-C_{17}-C_{14}$	$C_{17}-N_1-C_{16}-C_{14}$	$C_4-C_5-C_6-C_1$
Argônio	1,43	167,85	72,14	-0,01
Clorofórmio	4,71	167,61	73,40	-0,05
TetraHydroFuran	7,43	167,56	73,68	-0,07
Acetona	20,49	167,50	74,03	-0,09
Etanol	24,85	167,50	74,07	-0,10
Metanol	32,61	167,49	74,11	-0,10
DMSO	46,83	167,48	74,15	-0,11
Água	78,36	167,47	74,19	-0,11
Mistura de n-metilformamida	181,56	167,47	74,23	-0,11

A Figura 3 apresenta um gráfico que correlaciona a constante dielétrica dos nove solventes estudados, listados na Tabela 1, com seus respectivos valores de RMSD. As constantes dielétricas desses solventes variam de 1,43 a 181,56, enquanto os valores de RMSD obtidos estão em uma faixa estreita entre 0,54 e 0,55. O gráfico evidencia que a mistura de n-metilformamida se destaca por sua estabilidade comparativa, o que é sugerido pelo seu RMSD relativamente consistente em face das variações significativas nas constantes dielétricas dos solventes.



**Figura 3.** Evolução do parâmetro RMSD para os compostos em função da constante dielétrica.

Na Figura 4, é mostrado o momento dipolo total dos solventes estudados em relação à sua constante dielétrica. A estrutura molecular, que apresenta um excesso de carga, orienta o momento dipolo, uma propriedade física

definida pelo produto da magnitude da carga (em unidades eletrostáticas) pela distância entre as cargas (em centímetros).

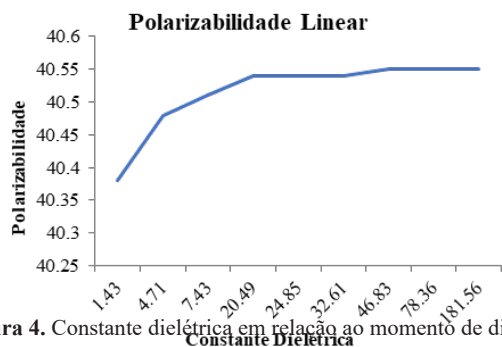


Figura 4. Constante dielétrica em relação ao momento de dipolo.

Na Figura 5, observa-se a relação entre a constante dielétrica dos solventes e sua polarizabilidade linear. Nota-se que uma polarizabilidade linear maior implica uma polarização mais intensa, o que indica uma maior capacidade da molécula de distorcer sua nuvem eletrônica em resposta a um campo elétrico externo. O gráfico mostra que, a partir do solvente etanol, ocorre um aumento acentuado na polarização linear, evidenciando a alta mobilidade dos elétrons  $\pi$  e as significativas distorções da nuvem eletrônica. Essas alterações afetam diretamente propriedades ópticas lineares, como absorção, reflexão e refração, as quais se tornam mais evidentes neste composto.

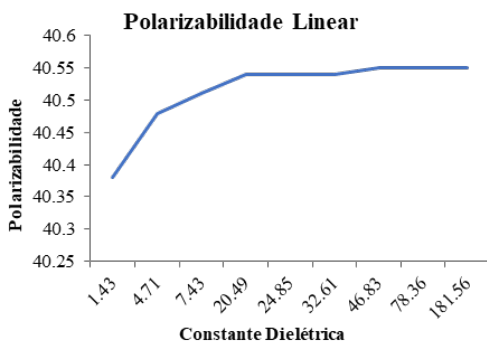


Figura 5. Constante dielétrica em relação à polarizabilidade linear.

Com base nos dados e análises apresentados nesta seção de resultados, foi possível estabelecer correlações

significativas entre as propriedades físico-químicas dos solventes e a estrutura molecular do composto HPMP. As constantes dielétricas, o RMSD e os ângulos de torção forneceram insights valiosos sobre a interação solvente-soluto e suas implicações na estabilidade e reatividade da molécula estudada.

Observou-se que o solvente clorofórmio exibiu o maior RMSD, indicando uma maior discrepância na estrutura molecular do HPMP quando comparado com a estrutura cristalina. Isto sugere um efeito significativo do ambiente dielétrico na configuração espacial da molécula. Além disso, a relação entre a polarização e a constante dielétrica dos solventes ressaltou a influência do meio na polarizabilidade e no momento dipolo do HPMP, que são fundamentais para entender suas propriedades ópticas.

As representações nas Figuras 4 e 5 ilustraram de forma clara a influência da constante dielétrica na polarizabilidade linear e no momento dipolo total dos solventes, proporcionando uma compreensão mais aprofundada das forças intermoleculares atuantes e suas consequências práticas.

## Conclusões

O estudo da molécula 1-{4-hydroxy-3-[(pyrrolidin-1-yl)methyl]phenyl}-3-phenylprop-2-en-1-one (HPMP) revelou uma sensibilidade notável às variações ambientais impostas pelos nove solventes investigados. A análise do desvio médio quadrático (RMSD) e da distância máxima interatômica mostrou que o clorofórmio induziu as alterações mais significativas na estrutura molecular do HPMP. Além disso, as maiores constantes dielétricas correlacionaram-se com as maiores variações nos ângulos de torção, no tamanho das ligações e nos ângulos atômicos, destacando a influência do ambiente dielétrico nas propriedades moleculares.

Notavelmente, a mistura de n-metilformamida, o solvente com a maior constante dielétrica estudada, apresentou os valores mais elevados de momento dipolo e polarizabilidade linear. Este achado reforça a hipótese

de que solventes com maiores constantes dielétricas exercem um efeito mais acentuado na estrutura e propriedades ópticas de moléculas como o HPMP.

Conclui-se que o HPMP é uma molécula opticamente ativa cuja reatividade é influenciada de maneira substancial pelos solventes, refletindo-se nas suas propriedades geométricas e dielétricas. Os dados coletados oferecem uma valiosa contribuição para o entendimento das interações físico-químicas do derivado de chalcona e fornecem uma base sólida para a expansão de pesquisas futuras, potencialmente guiando o desenvolvimento de novas aplicações e aprimoramentos tecnológicos.

## Referências

1. S.R. LEMES, L.A. JÚNIOR, D. DA SILVA MANOEL, M.A.M. DE SOUSA, R.D. FONSECA, R.S. LIMA, C. NODA-PEREZ, P.R. DE MELO REIS, C.G. CARDOSO, E. DE PAULA SILVEIRA-LACERDA, M.A.R. SOUZA, C.R. MENDONÇA, P.J. GONÇALVES, L. DE BONI, T.L. DA FONSECA, N.J. DA SILVA JUNIOR, Optical properties and antiangiogenic activity of a chalcone derivate, *Spectrochim. Acta Part A Mol. Biomol. Spectrosc.* 204 (2018) 685–695. doi:10.1016/j.saa.2018.06.099.
2. A.B. COUTO, L.A. RAMOS, É.T.G. CAVALHEIRO, Aplicação de pigmentos de flores no ensino de química, *Quim. Nova.* 21 (1998) 221–227. doi:10.1590/S0100-40421998000200020.
3. J.M.F. CUSTODIO, J.J.A. GUIMARÃES-NETO, R. AWAD, J.E. QUEIROZ, G.M.V. VERDE, M. MOTTIN, B.J. NEVES, C.H. ANDRADE, G.L.B. AQUINO, C. VALVERDE, F.A.P. OSÓRIO, B. BASEIA, H.B. NAPOLITANO, Molecular modelling and optical properties of a novel fluorinated chalcone, *Arab. J. Chem.* 13 (2020) 3362–3371. doi:10.1016/j.arabjc.2018.11.010.
4. W.R.S. DE CARVALHO, Estudo in vitro dos potenciais antioxidante, antimicrobiano e anti-HIV de extratos de *Hyptis lacustris* A. St.-Hil. ex Benth (Lamiaceae), Universidade de São Paulo, 2018. doi:10.11606/D.41.2018.tde-22012018-163639.
5. J.M.F. CUSTODIO, J.J.A. GUIMARÃES-NETO, R. AWAD, J.E. QUEIROZ, G.M.V. VERDE, M. MOTTIN, B.J. NEVES, C.H. ANDRADE, G.L.B. AQUINO, C. VALVERDE, F.A.P. OSÓRIO, B. BASEIA, H.B. NAPOLITANO, Molecular modelling and optical properties of a novel fluorinated chalcone, *Arab. J. Chem.* 13 (2020) 3362–3371. doi:10.1016/j.arabjc.2018.11.010.
6. L.R. ALMEIDA, M.M. ANJOS, G.C. RIBEIRO, C. VALVERDE, D.F.S. MACHADO, G.R. OLIVEIRA, H.B. NAPOLITANO, H.C.B. DE OLIVEIRA, Synthesis, structural characterization and computational study of a novel amino chalcone: a potential nonlinear optical material, *New J. Chem.* 41 (2017) 1744–1754. doi:10.1039/C5NJ03214H.
7. F. DE A. SANTOS, Estudo de propriedades ópticas não lineares de derivados de dibenzalacetona, 11 Universidade Federal de Sergipe, 2019. [https://bdtd.ibict.br/vufind/Record/UFS2\\_f66dff36789fc7476842a8d6b240d4e6](https://bdtd.ibict.br/vufind/Record/UFS2_f66dff36789fc7476842a8d6b240d4e6).
8. O.L. WHEI, J.T.X. DE BRITO NETO, Agentes complexantes: podante, coronante e criptante classificação e nomenclatura, *Quim. Nova.* 21 (1998). doi:10.1590/S0100-40421998000500015.
9. K.L.P. SRINIVASAN DAMODARAN, Abordagem Física de Compostos Orgânicos, Antonella Carvalho de Oliveira, 2019. doi:10.22533/at.ed.206191902.
10. P.L. SILVA, Solvatação em solventes puros e misturas binárias: fundamentos e aplicações, Universidade de São Paulo, 2011. doi:10.11606/T.46.2011.tde-02112011-122800.
11. M.V.S. OLIVEIRA, Emprego de Diferentes Fontes de Irradiação na Etanolise Enzimática de Óleos Vegetais para Síntese de Biodiesel, 2020.
12. <http://openrit.grupotiradentes.com:8080/xmlui/handle/set/3211>.
13. A. Aydın, M. Akkurt, H.I. Gul, K.O. Yerdelen, R.C. Celik, Crystal structure of 1-{4-hydroxy3-[(pyrrolidin-1-yl)methyl]phenyl}-3-phenylprop-2-en-1-one, *Acta Crystallogr. Sect. E Crystallogr. Commun.* 72 (2016) 696–698. doi:10.1107/S2056989016006009.
14. F. MACHADO, E.L. LIMA, J.C. PINTO, Uma revisão sobre os processos de polimerização em suspensão, *Polímeros.* 17 (2007) 166–179. doi:10.1590/S0104-14282007000200016.
15. E.A. COUTSIAS, C. SEOK, K.A. DILL, USING QUATERNIONS TO CALCULATE RMSD, *J. COMPUT. CHEM.* 25 (2004) 1849–1857. doi:10.1002/jcc.20110. 15 B.A. Reva, A. V Finkelstein, J. Skolnick, What is the probability of a chance prediction of a protein structure with an rmsd of 6 Å?, *Fold. Des.* 3 (1998) 141–147. doi:10.1016/S1359-0278(98)00019-4.
16. NIELSEN, S. F.; BOSEN, T.; LARSEN, M.; SCHONNING, K.; KROMANN, H.; BIOORG. Med. Chem. 2004, 12, 3047.
17. BHAKUNI, D. S.; CHATURVEDI, R.; *J. Nat. Prod.* 1984, 47, 585.
18. REDDY, M. V. B.; HWANG, T.; LEU, Y.; CHIOU, W.; WU, T.; *Bioorg. Med. Chem.* 2011, 19, 2751.



19. (A) DIMMOCK, J. R.; ELIAS, D. W.; BEAZELY, M. A.; KANDEPU, N. M.; *Curr. Med. Chem.* 1999, 6, 1125. (b) Cheenpracha, S.; Karalai, C.; Ponglimanont, C.; Subhadhirasakul, S.; Tewtrakal, S; *Bioorg. Med. Chem.* **2005**, 14, 1710.
20. (A) DYRAGER, C.; WICKSTRÖM, M.; FRIDÉN-SAXIN, M.; FRIBERG, A.; DAHLÉN, K.; WALLÉN, E. A. A.; GULLBO, J.; GROTLI, M.; LUTHMAN, K.; *BIOORG. MED. CHEM.* 2011, 19, 2659. (B) RUAN, B.; LU, X.; TANG, J.; WEI, Y.; WANG, X.; ZHANG, Y.; WANG, L.; ZHU, H.; *Bioorg. Med. Chem.* **2011**, 19, 2688.

---

**Poliana M. Silva<sup>1</sup>, Daphne  
Cristine Fernandes<sup>2</sup>, João  
V. B. Soares<sup>1</sup>, Jhenyfer C.  
de Castro<sup>2</sup>, Euripedes M.  
O. Junior<sup>1</sup> & Clodoaldo  
Valverde<sup>1,2,\*</sup>**

<sup>1</sup> Laboratório de Modelagem Molecular Aplicada e Simulação (LaMMAS),  
Universidade Estadual de Goiás, 75001-970, Anápolis, GO, Brazil.

<sup>2</sup> Universidade Paulista, 74845-090, Goiânia, GO, Brazil.

\*E-mail: valverde@ueg.br