

ESTUDO DO EFEITO SOLVENTE SOBRE AS PROPRIEDADES ÓPTICAS LINEARES DE UM 4-BROMO-N-[(4-NITROPHENYL) SULFONYL] BENZAMIDE (APOIO CNPq)

Aluna: Lorena Silva Santos

Orientador: Prof. Dr. Clodoaldo Valverde

Curso: Engenharia Civil

Campus: Goiânia

Nos últimos anos, o estudo de moléculas orgânicas tem atraído grande interesse da comunidade científica, como por exemplo, os derivados de N-(arylsulfonyl)arylamides, que constituem uma importante classe de medicamentos para o tratamento de doenças de Alzheimer. Atuam também como antagonistas para angiotensina II, um importante peptídeo do sistema renina-angiotensina-aldosterona (SRAA) que assume papel importante na regulação da pressão sanguínea e homeostase dos fluidos corporais, mas que em condições anormais gera efeitos prejudiciais ao sistema cardiovascular. Já na área da tecnologia, as propriedades ópticas não lineares (NLO) dos compostos orgânicos, por causa de sua fácil manipulação e as suas amplas aplicações na espectroscopia, fotônica, optoeletrônica, etc., têm provocado um grande interesse dos pesquisadores nas mais diversas áreas do conhecimento científico. Moléculas com propriedades ópticas não lineares são de grande importância para aplicações integradas à óptica e outras seções da ciência de materiais. Portanto, o entendimento das propriedades ópticas dos materiais é de extrema importância, pois a partir delas obtêm-se as formas de manipulação da luz. As propriedades geométricas da estrutura cristalina da molécula 4-bromo-N-[(4-nitrophenyl)sulfonyl] benzamide, sintetizado por S. Naveen et al., foram estudadas em dezenove meios solventes e na fase gasosa. O efeito do solvente foi simulado pelo Modelo Contínuo Polarizável (PCM) por meio da Teoria do Funcional da Densidade (DFT), utilizando o funcional B3LYP e o conjunto de funções base 6-311++G(d,p). Posteriormente, foi feita uma análise por meio do RMSD (*Root Mean Square Deviation*) e da Máxima Distância por

meio da sobreposição da estrutura cristalina e a molécula otimizada em solvente. As propriedades elétricas como o Momento de Dipolo e a Polarizabilidade Linear foram calculadas utilizando DFT/B3LYP/6-311++G(d,p). O valor do Momento de Dipolo Total aumenta com o crescimento da polaridade do solvente, o que acontece de forma inversa no caso da Polarizabilidade Linear Média, em que estes valores decaem.