



E457

APLICAÇÃO DE CEBES (CORE ELECTRON BINDING ENERGY) EM ESTUDOS DE REATIVIDADE QUÍMICA, SAR/QSAR E NA APRECIÇÃO DO MÉTODO HAM/3.

Danilo Ribeiro de Lima (Bolsista FAPESP) e Prof. Dr. Yuji Takahata (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

A constante σ de Hammett é um dos descritores mais importantes em SAR/QSAR tradicional. Tal constante passou a ser conhecida como uma constante de grupo, pois reflete a influência eletrônica de um dado grupo substituinte independentemente da reação ou molécula em que está ligado. O valor de σ reflete também a grandeza dos efeitos indutivo e de ressonância exercido pelo grupo substituinte no centro de reação ou na propriedade físico-química medida. Devido à importância dessa constante, é interessante verificar uma relação entre Δ CEBE teóricos e constantes σ de Hammett. Para benzenos substituídos, Linderberg et al. demonstrou que a variação de CEBEs correlaciona-se linearmente com a constante σ . Foi analisada a relação entre esses Δ CEBE, obtidos por cada método (HAM/3 e DFT), com constantes σ (obtida em solvente aquoso) para 31 compostos fenílicos monosubstituídos, obtendo bons resultados. Além disso, boas correlações foram obtidas entre Δ CEBE calculados pelo HAM/3 e DFT, para substituintes menores. Assim, percebe-se que o método semi-empírico HAM/3 fornece CEBEs que correlacionam bem com σ e outros CEBEs (DFT). Em outra etapa do trabalho, foi analisada a viabilidade do descritor CEBE em análises de SAR/QSAR em ácidos fenoxiacético (auxinas), sem muito êxito.

CEBE - QSAR - Quimiometria