

ESTUDO TEÓRICO DO PERFIL ANTIOXIDANTE DA COORDENAÇÃO DA ZINGERONA COM FERRO (II)

XXXVII Encontro de Iniciação Científica

Lucas da Hora Ramos, JOSÉ ROBERVAL CÂNDIDO JÚNIOR, Pedro de Lima Neto

Radicais são moléculas que possuem um elétron desemparelhado. Quando em excesso são prejudiciais a organismos vivos por alterar a estrutura das moléculas, levando a perda de suas funções e contribuindo para o desenvolvimento de doenças degenerativas tais como doença de Parkinson e câncer. Antioxidantes são moléculas capazes de reagir com radicais e formar espécies menos reativas, formando produtos menos danosos. Compostos fenólicos são bons antioxidantes, já que o anel aromático presente nestes estabiliza o radical por ressonância. A zingerona (ZIN) é um composto obtido da secura do gengibre que possui um bom perfil antioxidante, porém é susceptível de oxidação, formando uma quinona que é hepatotóxica. Estudos computacionais de DFT (Density Functional Theory) se mostram eficientes em propor modificações em moléculas para melhorar suas propriedades, evitando gastos com experimentos. O objetivo deste trabalho foi avaliar computacionalmente o perfil antioxidante da ZIN coordenada a um íon ferro (II) em comparação à molécula livre. Os cálculos foram feitos utilizando os recursos do CENAPAD/UFC no programa Gaussian 09 com o método DFT M06-2X/LanL2DZ. A coordenação aconteceu na proporção 1:1 pelos sítios fenólico e metoxílico da ZIN. Os sítios investigados foram: metoxílico, benzílico e os dois sítios α -carbonílicos. O perfil antioxidante foi avaliado pela energia de Gibbs da reação da ZIN com radical hidroxila. Foi verificado que a coordenação melhorou o perfil antioxidante de todos os sítios, sendo mais reativo o benzílico com energia de reação $-21,7 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ na molécula livre e $-40,2566 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ após a coordenação. Estes valores sugerem que a coordenação com íon ferro (II) melhorou o perfil antioxidante da ZIN. Estes resultados sugerem que a estratégia de coordenar moléculas fenólicas com íons metálicos é eficiente para melhorar o perfil antioxidante destas.

Palavras-chave: DFT. Zingerona. Antioxidante. Íon Metálico.