

INSTITUTO FEDERAL GOIANO – CAMPUS CERES
LICENCIATURA EM QUÍMICA
VITOR BARBOSA MARQUES

ESTUDO TEÓRICO POR DFT DAS PROPRIEDADES
ESTRUTURAIS E ELETRÔNICAS DO FÁRMACO ADAPALENO

CERES – GO
2021

VITOR BARBOSA MARQUES

**ESTUDO TEÓRICO POR DFT DAS PROPRIEDADES
ESTRUTURAIS E ELETRÔNICAS DO FÁRMACO ADAPALENO**

Trabalho de curso apresentado ao curso de
Licenciatura em Química do Instituto Federal Goiano –
Campus Ceres, como requisito parcial para a obtenção
do título de Licenciado em Química, sob orientação do
Prof. Dr. Rafael Gomes da Silveira.

**CERES – GO
2021**

Sistema desenvolvido pelo ICMC/USP
Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Sistema Integrado de Bibliotecas - Instituto Federal Goiano

MM357e Marques, Vitor Barbosa
ESTUDO TEÓRICO POR DFT DAS PROPRIEDADES
ESTRUTURAIS E ELETRÔNICAS DO FÁRMACO ADAPALENO /
Vitor Barbosa Marques; orientador Rafael Gomes da
Silveira. -- Ceres, 2021.
12 p.

TCC (Graduação em Licenciatura em Química) --
Instituto Federal Goiano, Campus Ceres, 2021.

1. Adapaleno. 2. DFT. 3. IV TEÓRICO. 4. HOMO/LUMO.
I. Gomes da Silveira, Rafael, orient. II. Título.

Responsável: Johnathan Pereira Alves Diniz - Bibliotecário-Documentalista CRB-1 nº2376

TERMO DE CIÊNCIA E DE AUTORIZAÇÃO PARA DISPONIBILIZAR PRODUÇÕES TÉCNICO-CIENTÍFICAS NO REPOSITÓRIO INSTITUCIONAL DO IF GOIANO

Com base no disposto na Lei Federal nº 9.610, de 19 de fevereiro de 1998, AUTORIZO o Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Goiano a disponibilizar gratuitamente o documento em formato digital no Repositório Institucional do IF Goiano (RIIF Goiano), sem ressarcimento de direitos autorais, conforme permissão assinada abaixo, para fins de leitura, download e impressão, a título de divulgação da produção técnico-científica no IF Goiano.

IDENTIFICAÇÃO DA PRODUÇÃO TÉCNICO-CIENTÍFICA

- | | |
|--|---|
| ☐ Tese (doutorado) | ☐ Artigo científico |
| ☐ Dissertação (mestrado) | ☐ Capítulo de livro |
| ☐ Monografia (especialização) | ☐ Livro |
| ☒ TCC (graduação) | ☐ Trabalho apresentado em evento |

☐ Produto técnico e educacional - Tipo:

Nome completo do autor:

Vitor Barbosa Marques

Matrícula:

Título do trabalho:

ESTUDO TEÓRICO POR DFT DAS PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E ELETRÔNICAS DO FÁRMACO ADAPALENO

RESTRIÇÕES DE ACESSO AO DOCUMENTO

Documento confidencial: ☐ Não ☒ Sim, justifique:

Arquivo para publicação na revista Química Nova.

Informe a data que poderá ser disponibilizado no RIIF Goiano: 05 / 05 / 2025

O documento está sujeito a registro de patente? ☐ Sim ☒ Não

O documento pode vir a ser publicado como livro? ☐ Sim ☒ Não

DECLARAÇÃO DE DISTRIBUIÇÃO NÃO-EXCLUSIVA

O(a) referido(a) autor(a) declara:

- Que o documento é seu trabalho original, detém os direitos autorais da produção técnico-científica e não infringe os direitos de qualquer outra pessoa ou entidade;
- Que obteve autorização de quaisquer materiais inclusos no documento do qual não detém os direitos de autoria, para conceder ao Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Goiano os direitos requeridos e que este material cujos direitos autorais são de terceiros, estão claramente identificados e reconhecidos no texto ou conteúdo do documento entregue;
- Que cumpriu quaisquer obrigações exigidas por contrato ou acordo, caso o documento entregue seja baseado em trabalho financiado ou apoiado por outra instituição que não o Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Goiano.

Ceres - Go

Local

13 / 11 / 2022

Data

Vitor Barbosa Marques

Assinatura do autor e/ou detentor dos direitos autorais

Ciente e de acordo:

Rafael Gomes da Silva

Assinatura do(a) orientador(a)



SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL
MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
SECRETARIA DE EDUCAÇÃO PROFISSIONAL E TECNOLÓGICA
INSTITUTO FEDERAL DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA GOIANO

Ata nº 36/2022 - GE-CE/DE-CE/CMPCE/IFGOIANO

ATA DE DEFESA DE TRABALHO DE CURSO

Aos vinte dias do mês de janeiro do ano de dois mil e vinte e dois, realizou-se a defesa do Trabalho de Curso do acadêmico **Vitor Barbosa Marques**, do Curso de Licenciatura em Química, matrícula 2018103221530325, cujo título é "ESTUDO TEÓRICO POR DFT DAS PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E ELETRÔNICAS DO FÁRMACO ADAPALENO". A defesa iniciou-se às 19 horas e 30 minutos, finalizando-se às 20:35 horas. A banca examinadora considerou o trabalho APROVADO com média 9,26 no trabalho escrito, média 9,16 no trabalho oral, apresentando assim média aritmética final 9,21 de pontos, estando o(a) estudante APTO para fins de conclusão do Trabalho de Curso.

Após atender às considerações da banca e respeitando o prazo disposto em calendário acadêmico, o estudante deverá fazer a submissão da versão corrigida em formato digital (.pdf) no Repositório Institucional do IF Goiano - RIIF, acompanhado do Termo Ciência e Autorização Eletrônico (TCAE), devidamente assinado pelo autor e orientador. Os integrantes da banca examinadora assinam a presente.

(Assinado Eletronicamente)
Dr. Rafael Gomes da Silveira

(Assinado Eletronicamente)
Dr. Ilmo Correia Silva

Dr. João Honorato Neto

Observação:

() O(a) estudante não compareceu à defesa do TC.

Documento assinado eletronicamente por:

- Rafael Gomes da Silveira, PROFESSOR ENS BASICO TECN TECNOLOGICO, em 02/02/2022 18:57:21.
- Ilmo Correia Silva, PROFESSOR ENS BASICO TECN TECNOLOGICO, em 29/01/2022 10:55:13.

Este documento foi emitido pelo SUAP em 20/01/2022. Para comprovar sua autenticidade, faça a leitura do QRCode ao lado ou acesse <https://suap.ifgoiano.edu.br/autenticar-documento/> e forneça os dados abaixo:

Código Verificador: 349671
Código de Autenticação: 238f74075b



DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho a Deus; sem ele eu não teria capacidade para desenvolver este trabalho.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente a Deus que permitiu que tudo isso acontecesse, ao longo de minha vida, e não somente nestes anos como universitário, mas que em todos os momentos é o maior mestre que alguém pode conhecer.

Ao Instituto Federal Goiano, pela oportunidade de fazer o curso.

Ao Prof. Dr. Rafael Gomes pela oportunidade e apoio na elaboração deste trabalho.

Agradeço a minha mãe Alenice, heroína que me deu apoio, incentivo nas horas difíceis, de desânimo e cansaço.

Meus agradecimentos aos amigos José, Amarildo, Severina, Jovana, Jessica, companheiros de trabalhos e irmãos na amizade que fizeram parte da minha formação e que vão continuar presentes em minha vida com certeza.

A todos que direta ou indiretamente fizeram parte de minha formação, o meu muito obrigado.

“Educar verdadeiramente não é ensinar fatos novos ou enumerar fórmulas prontas, mas sim preparar a mente para pensar.”

Albert Einstein

RESUMO

Este trabalho apresenta o estudo teórico das propriedades estruturais e eletrônicas do fármaco Adapaleno. O estudo utiliza o método DFT utilizando o funcional M06-2x e “basis set” 6-311G(2d,2p). A estrutura foi otimizada, o espectro vibracional na região do infravermelho teórico apresenta duas bandas principais localizadas em 1313 cm^{-1} que foi atribuída aos dobramentos no plano do grupo O-H da carbonila e CH do anel adamantano e em 1874 cm^{-1} atribuída ao estiramento do grupo CO da carbonila. Os orbitais de fronteira HOMO e LUMO foram calculados com energias de -0,264410 e -0,043470 hartree e o gap obtido foi de 143.9 Kcal/mol. O espectro de absorção na região do UV-vis apresentou quatro bandas principais em 170, 207, 237 e 282 nm.

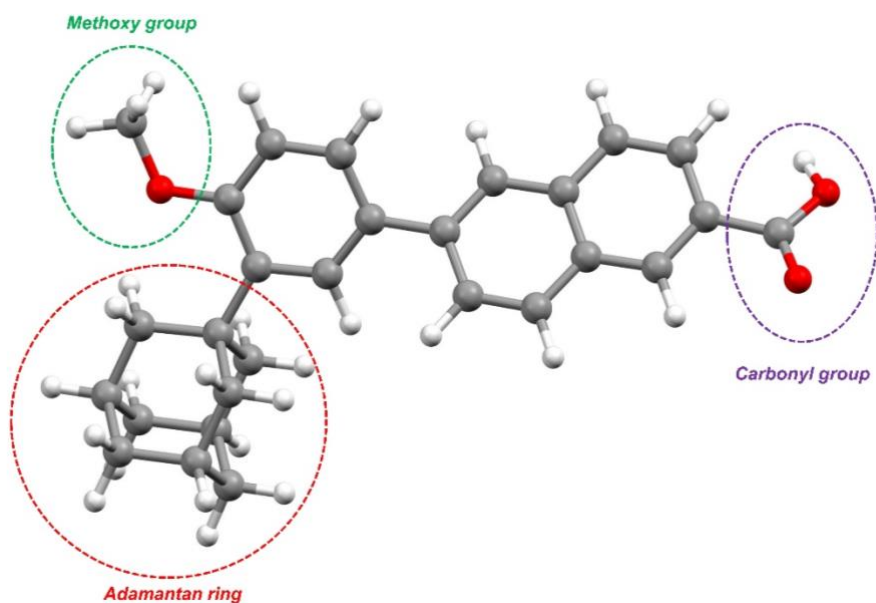
Palavras-chave: Adapaleno; DFT; IV TEÓRICO; HOMO/LUMO.

ABSTRACT

This paper presents the theoretical study of the structural and electronic properties of the drug Adapalene. The study uses the DFT method with functional M06-2x and basis set "6-311G(2d,2p)". The structure was optimized, the vibrational spectrum in the theoretical infrared region presents two main bands located at 1313 cm^{-1} which was attributed to the folding in the plane of the OH group of the carbonyl and CH of the adamantane ring and at 1874 cm^{-1} attributed to the stretching of the carbonyl CO group. The HOMO and LUMO frontier orbitals were calculated with energies of -0.264410 and -0.043470 hartree and the gap obtained was 143.9 Kcal/mol. The absorption spectrum in the UV-vis region showed four main bands at 170, 207, 237 and 282 nm.

Keywords: Adapalene; DFT; IR THEORETICAL; HOMO / LUMO.

Graphical Abstract



Structure of adapalene was analyzed on the theoretical and electronic methods by DFT in Gaussian09 @ software.

ESTUDO TEÓRICO POR DFT DAS PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E ELETRÔNICAS DO FÁRMACO ADAPALENO

Vitor Barbosa Marques^{a,*}, Jovana Silva de Lima^a, Rafael Gomes da Silveira^a.

^aInstituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Goiano, 76300-000 Ceres - GO, Brasil

(x) Manuscrito com material suplementar

() Manuscrito sem material suplementar

*e-mail: vitor.marques@estudante.ifgoiano.edu.br

THEORETICAL DFT STUDY OF THE STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF THE ADAPALENE PHARMACEUTICAL.

This paper presents the theoretical study of the structural and electronic properties of the drug Adapalene. The study uses the DFT method with functional M06-2x and basis set "6-311G(2d,2p)". The structure was optimized, the vibrational spectrum in the theoretical infrared region presents two main bands located at 1313 cm^{-1} which was attributed to the folding in the plane of the OH group of the carbonyl and CH of the adamantane ring and at 1874 cm^{-1} attributed to the stretching of the carbonyl CO group. The HOMO and LUMO frontier orbitals were calculated with energies of -0.264410 and -0.043470 hartree and the gap obtained was 143.9 Kcal/mol. The absorption spectrum in the UV-vis region showed four main bands at 170, 207, 237 and 282 nm.

Keywords: Adapalene; DFT; IR THEORETICAL; HOMO / LUMO.

INTRODUÇÃO

Desde os tempos antigos, os humanos usam as propriedades das substâncias para tratar doenças, e os remédios mais antigos foram extraídos das plantas. O estabelecimento da farmácia começou em Galeno, médico conceituado em Roma (129-199 aC), que utilizava extratos vegetais para o tratamento de diversas doenças. Na época de Galeno, as pessoas simplesmente adivinhavam a existência de átomos, mas a ciência de hoje propõe-se em um nível muito avançado, onde o arranjo dos átomos na estrutura pode ser claramente determinado.[1]

A química estrutural busca analisar as propriedades de compostos, verificando os comprimentos e ângulos de ligação, ângulos de torção, polaridade, interações intramoleculares e intermoleculares (ligações de hidrogênio e forças de Van der Waals). [2][3][4] Tais informações sobre o comportamento dos sistemas moleculares é de fundamental importância para compreensão das aplicações de um determinado sistema.

A indústria farmacêutica atual tem grande importância no desenvolvimento de novas drogas e uma melhor compreensão estrutural dos fármacos já disponíveis. Tais informações são, assim, de grande importância para a medicina, tecnologia e economia. A avaliação das relações estrutura-atividade também é uma grande área de desenvolvimento na análise farmacêutica.[5]

Um fármaco de grande importância que apresenta grupo adamantano em sua estrutura é o Adapaleno. O medicamento é usado principalmente para o tratamento local da acne, além de ser indicado para o tratamento do fotoenvelhecimento cutâneo, que é consequência da exposição ao sol e se desencadeia, principalmente após os 30 anos. Além das aplicações existentes, estudos têm demonstrado que a estrutura possui propriedades antitumorais, indicando que o fármaco possui grande potencial de aplicação.[6]

A acne vulgar é uma doença inflamatória crônica muito comum, afetando principalmente a face, as costas e o tórax. Durante a adolescência, o impacto da acne diminui à medida que a idade adulta se aproxima, mas, em alguns casos, a doença ainda é um problema para toda a vida. Embora a estrutura do medicamento Adapaleno seja extremamente importante na indústria farmacêutica, nenhum estudo estrutural foi realizado até o momento, o que mostra um campo muito promissor da química estrutural teórica.[7]

Este projeto insere-se dentro da química estrutural teórica e visa explorar as propriedades estruturais e eletrônicas do fármaco Adapaleno por métodos DFT. Foi obtida a estrutura otimizada do fármaco, além dos espectros vibracionais e eletrônicos.

Materiais e métodos

Os cálculos teóricos realizados para o estudo computacional da molécula Adapaleno foram realizados no software Gaussian16.[8] Na primeira etapa, input é desenhado no software ChemSketch®. Os cálculos de otimização no estado fundamental foram realizados com métodos DFT (Teoria Funcional da Densidade), usando o funcional M06-2X e “*basis set*” 6-311G(2d,2p) para todos os átomos.[9] A otimização é confirmada pela ausência de frequências imaginárias no espectro vibracional teórico. Foram realizadas as análises de cargas atômicas, energia dos orbitais de fronteira (HOMO e LUMO), mapa de potencial eletrostático, além do espectro teórico de absorção na região do UV-vis com método TD-DFT com o funcional M06-2X e “*basis set*” 6-311G(2d,2p) para os 60 primeiros estados excitados no vácuo. A visualização dos dados foi realizada no software Gabedit.[10]

RESULTADOS E DISCUSSÃO

O fármaco Adapaleno é vendido comercialmente com o nome *Adapaleno* e *Adacne*, a estrutura com a numeração adotada neste trabalho é apresentada na **Figura 1**. A estrutura apresenta fórmula molecular $C_{28}H_{28}O_3$, sendo que faz parte da terceira geração de fármacos que sintetizam o ácido retinóico.

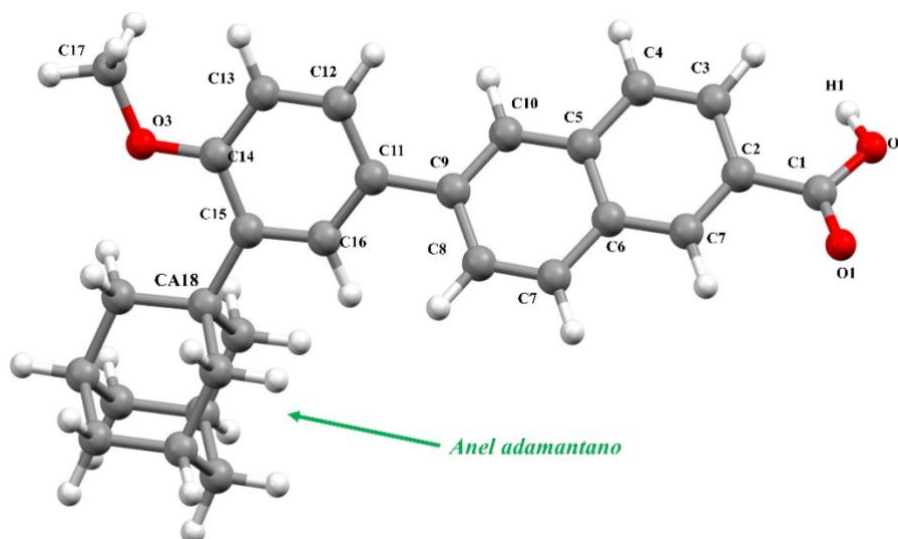


Figura 1. Estrutura do fármaco Adapaleno com a numeração adotada neste trabalho.

Como podemos observar, a estrutura apresenta os grupos funcionais carbonila (C1), metoxila (C14), anel adamantano ligado ao C15, além de grupos aromáticos. Os comprimentos de ligação e ângulos selecionados são apresentados na **Tabela 1**.

Tabela 1 - Comprimentos de ligação e ângulos selecionados do fármaco Adapaleno

Comprimento [Å]*		Ângulo [°]	
C17-O3(metoxila)	1.410	O1-C1-O2(carboxila)	119.938
C1=O1(carbonila)	1.195	C1-O2-H1	110.740
C1-O2	1.359	C14-O3-C17(metoxila)	118.674
O2-H1	0.960	C2-C1-O1	123.375
C14-O3	1.359	C2-C1-O2	116.685
C15-C18	1.540	C15-C14-O3	118.654
O3-C17	1.410	C3-C2-C1	117.416

*1Å corresponde a 10^{-10} m

Os comprimentos de ligação obtidos, estão de acordo com os valores típicos esperados para os grupos analisados. A concordância com dados disponíveis na base de dados cristalográficos CCDC, indica a validade do nível de teoria utilizado para essa classe de compostos. Na molécula estudada os de ligação C17-O3 apresenta 1,410 Å, C1=O1 1,195 Å, para C1-O2 do grupo carboxila a distância carbono oxigênio é 1,359 Å, sendo os

comprimentos de ligação obtidos, característico da ligação simples e uma ligação dupla no grupo carboxila.

O grupo adamantano liga-se a partir do C18 a um anel aromático pelo carbono C15, sendo que esta ligação apresenta 1,540 Å, indicando que grupo adamantano se liga ao anel aromático por uma ligação simples C-C.

Os ângulos selecionados O1-C1-O2 e C1-O2-H1 do grupo carboxila apresentam 119,93° e 1110,74°, respectivamente. O ângulo C14-O3-C17 do grupo metoxila é 118, 67°. Os dados obtidos para os ângulos analisados mostram que existem pequenos desvios dos ângulos ideais, indicando os efeitos de repulsão dos pares de elétrons dos grupos avaliados. O método utilizado mostrou-se eficiente para obtenção da estrutura otimizada do Adapaleno, com valores de comprimentos de ligação e ângulos calculados são concordantes com os valores encontrados experimentalmente nas bases de dados cristalográficos para estrutura parecidas.

O espectro teórico de absorção na região do infravermelho permite avaliar os modos vibracionais permitidos da molécula, e é usado como parâmetro para confirmação da otimização da estrutura, pois se a estrutura obtida apresentar um ponto de mínimo global de energia potencial, nenhuma frequência imaginária (frequência negativa) aparecerá no espectro. Para a molécula do Adapaleno que possui 59 átomos e geometria não linear, temos 3N-6 graus de liberdade e 171 modos vibracionais. Sendo o espectro vibracional e as frequências obtidos, mostrado na **Tabela 2** e **Figura 2**.

Tabela 2 - Tentativa de atribuição das principais absorções no espectro vibracional na região do infravermelho do fármaco Adapaleno.

Frequência (cm ⁻¹) Não escalonada	Frequência (cm ⁻¹) Escalaonada*	Tentativa de atribuição
492.2	473.2	δ O-H + δ C-H _{aromático}
1107.8	1065.0	δ C-O _{metoxila} + δ C-H _{aromático}
1313.4	1262.7	$\delta_{\text{foraplano}}$ C-H anel adamantano + δ_{plano} O-H
1530.8	1471.7	δ_{plano} C-H grupo metóxi
1704.1	1638.3	δ_{plano} C-H aromáticos
1874.2	1801.8	σ C=O
3068.1	2949.6	σ simétrico C-H adamantano
3118.8	2998.4	σ simétrico CH ₂ adamantano
3126.4	3005.7	σ assimétrico CH sp ³
3896.9	3746.4	σ O-H

Escalaonada* pelo fator 0.9416; δ dobramento; σ estiramento; σ_s estiramento simétrico; σ_{as} estiramento assimétrico;

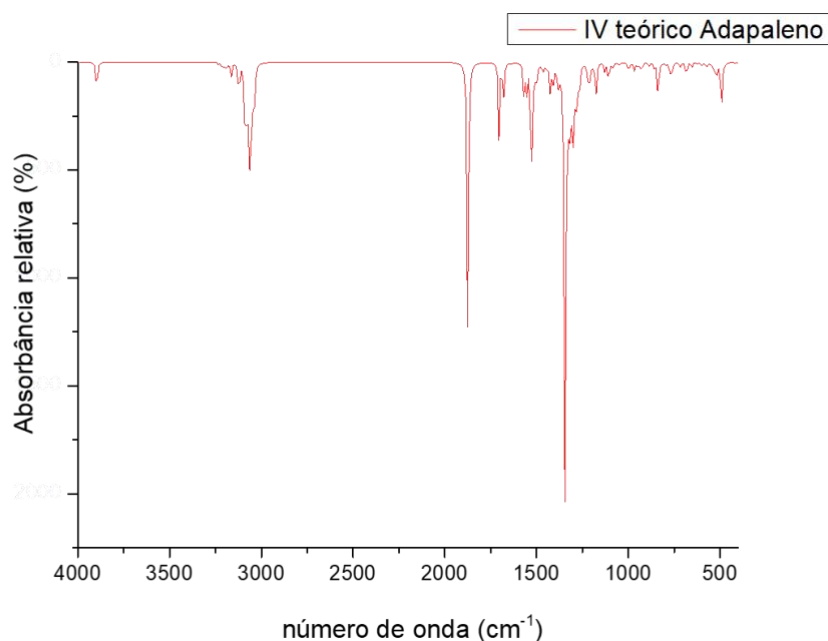


Figura 2. *Análise do espectro de IV teórico do fármaco Adapaleno*

O espectro de IV teórico obtido para o fármaco Adapaleno não apresenta nenhuma frequência imaginária (frequência negativa), indicando que a estrutura analisada corresponde a um mínimo de energia. Pode-se observar que as duas bandas mais intensas do espectro estão localizadas em 1313 cm^{-1} que podem ser atribuídas aos dobramentos no plano dos grupos O-H da carbonila e CH do anel adamantano e em 1874 cm^{-1} atribuída ao estiramento da carbonila. As bandas em 3126 e 3118 cm^{-1} são atribuídas aos estiramentos assimétricos dos grupos CH_2 do anel adamantano em combinação com estiramento assimétrico do grupo CH_3 da metoxila.

Após a obtenção da estrutura otimizada permite analisar as energias dos orbitais de fronteira HOMO/LUMO, chamado de “gap”, que é a diferença entre os orbitais ocupados de maior energia e o desocupado de menor energia, apresentado na **Figura 3 e Figura 4**.

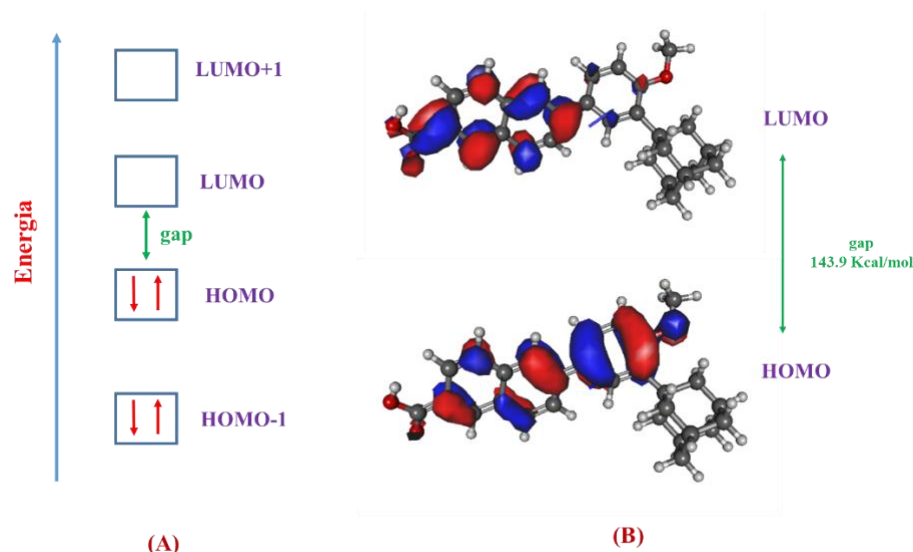


Figura 3 – Representação genérica dos orbitais de fronteira (A) e representação dos orbitais HOMO, LUMO e do gap do fármaco Adapaleno (B).

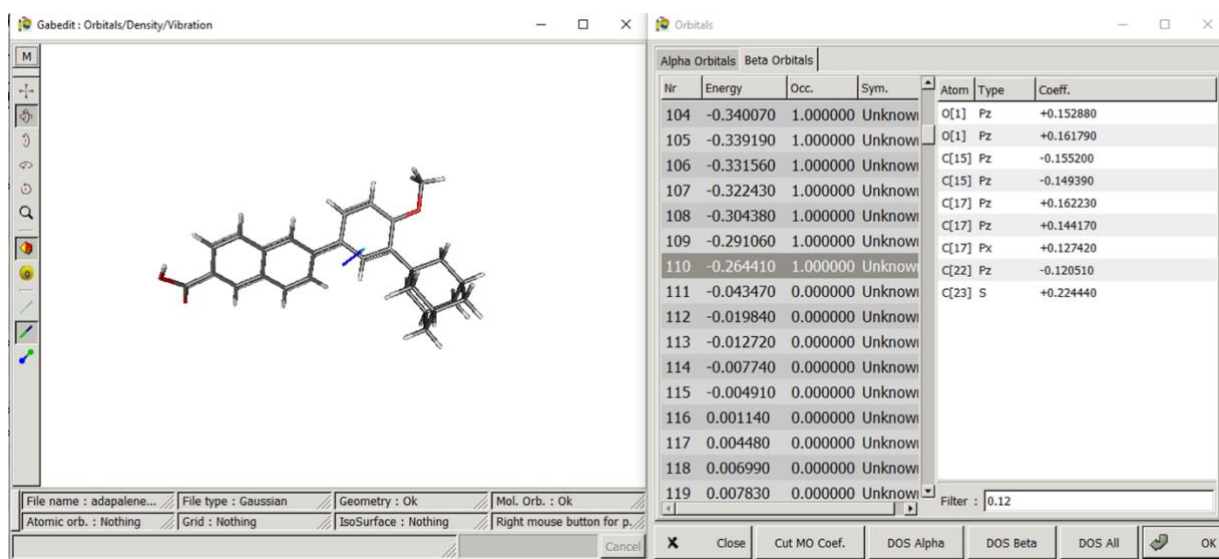


Figura 4 – Energia dos orbitais de fronteira do fármaco adapaleno.

Os orbitais de fronteira HOMO e LUMO calculados para o fármaco Adapaleno apresentam as energias -0,264410 e -0,043470 hartree, respectivamente. Podemos observar que os orbitais que formam o orbital HOMO estão localizados principalmente pelos orbitais Py sobre todos os anéis aromáticos presentes no fármaco, enquanto na formação do orbital LUMO temos a presença de orbitais Px, Py e S localizados principalmente sobre os dois anéis aromáticos mais próximos do grupo carbonila. O gap para a estrutura do Adapaleno é de 0,22094 hartree (143.9

Kcal/mol).

As transições eletrônicas observadas nos espectros de UV-vis são diretamente ligadas as diferenças de energias entre os orbitais ocupados e desocupados, sendo que estas informações teóricas nos permitem compreender como ocorrem as transições observadas.

O espectro de absorção na região do UV-vis teórico do fármaco Adapaleno (**Figura 5**) apresenta quatro bandas principais, onde os máximos de absorção ocorrem em 170, 207, 237 e 282 nm. Podemos observar também que o espectro não apresenta banda acima de 400 nm, o que indica que o composto é incolor.

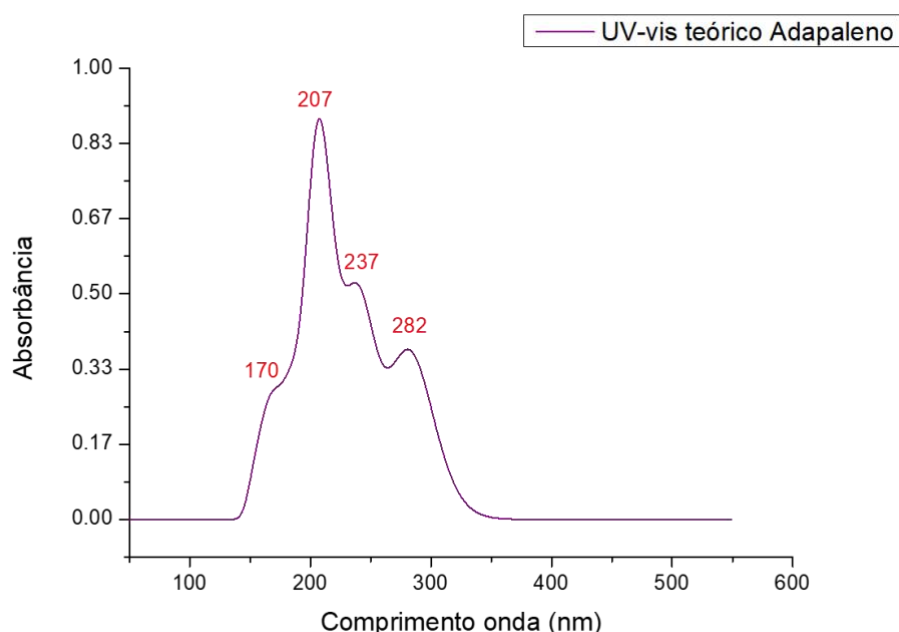


Figura 5. Espectro de absorção na região do UV-vis do fármaco adapaleno

As principais absorções do espectro teórico obtido e a formação de cada banda são apresentadas na **Tabela 3**. A banda em 170 nm é formada principalmente pelas transições entre os orbitais HOMO-3 $\rightarrow$ LUMO (2,8%), HOMO-1 $\rightarrow$ LUMO+1 (3,2%) e HOMO $\rightarrow$ LUMO (87%), esta absorção é atribuída como sendo do tipo $\pi \rightarrow \pi^*$.

A banda em 207 nm corresponde principalmente as transições dos orbitais HOMO-2 $\rightarrow$ LUMO (41,0%) HOMO-1 $\rightarrow$ LUMO+1 (22,2%) que é atribuída a transição do tipo $n \rightarrow \pi^*$. A banda em 237 nm corresponde principalmente as transições dos orbitais HOMO $\rightarrow$ LUMO+2 (20,5%) e HOMO-1 $\rightarrow$ LUMO (77,3%) que pode ser atribuída a uma transição do tipo $n \rightarrow \pi^*$.

E por último a absorção em 282 nm corresponde as transições eletrônicas

HOMO-3 $\rightarrow$ LUMO (2,8%), HOMO-1 $\rightarrow$ LUMO+1 (3,2%) e a transição principal é de HOMO $\rightarrow$ LUMO (87%) que pode ser atribuída a uma transição do tipo $\pi \rightarrow \pi^*$.

Tabela 3 – *Dados das principais bandas do espectro UV-vis teórico do fármaco Adapaleno.*

Estado Excitado	λ máx	*f	Transições
5	282	0.4795	HOMO-3 $\rightarrow$ LUMO (2,8%)
			HOMO-1 $\rightarrow$ LUMO+1 (3,2%)
			HOMO $\rightarrow$ LUMO (87%)
15	237	0.5238	HOMO $\rightarrow$ LUMO+2 (20,5%)
			HOMO-1 $\rightarrow$ LUMO (77.3%)
20	207	0.5284	HOMO-2 $\rightarrow$ LUMO (41,0%)
			HOMO-1 $\rightarrow$ LUMO+1 (22.2%)
			HOMO $\rightarrow$ LUMO+2 (18.7%)
59	170	0.0924	HOMO-2 $\rightarrow$ LUMO+3 (30.4%)
			HOMO-8 $\rightarrow$ LUMO+1 (15.4%)
			HOMO-1 $\rightarrow$ LUMO+3 (9.5%)
			HOMO $\rightarrow$ LUMO+6 (3.7%)

*f = força do oscilador

As transições observadas teoricamente contribuem na atribuição das bandas observadas no espectro de UV-vis, pois nem sempre as transições são de fácil análise.

CONCLUSÃO

Neste artigo foi realizada a otimização da estrutura do fármaco adapaleno, partindo-se das coordenadas tridimensionais criadas no software ChemSketch®, sendo que os comprimentos e ângulos de ligação estão de acordo com os dados reportados para estruturas semelhantes. A estrutura do Adapaleno que possui 59 átomos e geometria não linear, temos 3N-6 graus de liberdade e apresentou todos os 171 modos vibracionais. As duas bandas mais intensas do espectro de IV estão localizadas em 1313 cm^{-1} que foi atribuída aos dobramentos no plano dos grupos O-H da carbonila e CH do anel adamantano e em 1874 cm^{-1} atribuída ao estiramento do grupo CO da carbonila. Os orbitais de fronteira HOMO e LUMO foram calculados com energias de -0,264410 e -0,043470 hartree, respectivamente. O gap obtido foi de 143.9 Kcal/mol. O espectro de absorção na região do UV-vis apresentou quatro bandas principais em 170, 207, 237 e 282 nm. Os dados obtidos estão concordantes com dados reportados na literatura o que indica que o nível de teoria utilizado para este trabalho é adequado.

MATERIAL SUPLEMENTAR

Quando houver material suplementar, ele deve ser indicado aqui, com a descrição do material, similar a: Algumas imagens dos sistemas utilizados neste trabalho estão disponíveis em <http://quimicanova.sbq.org.br>, na forma de arquivo PDF, com acesso livre.

REFERÊNCIAS

1. Barreiro EJ. Sobre a Química dos Remédios, dos Fármacos e dos Medicamentos. Química Nova, 2001.
2. Rocha WR. Interações Intermoleculares. Química Nova, 2001.
3. Li X-Z, Walker B, Michaelides A. Quantum nature of the hydrogen bond. Proceedings of the National Academy of Sciences. 2011. doi:10.1073/pnas.1016653108
3. Li X-Z, Walker B, Michaelides A. Quantum nature of the hydrogen bond. Proceedings of the National Academy of Sciences. 2011. Doi:10.1073/pnas.1016653108
4. John Kotz, Paul Treichel, John Townsend DT. Química Geral e reações químicas. 3a. Learning C, editor. 2015.
5. Carvalho I, Pupo MT, Borges ÁDL, Bernardes LSC. Introdução a modelagem molecular de fármacos no curso experimental de química farmacêutica. Química Nova. 2003;26: 428–438. doi:10.1590/S0100-40422003000300023
6. MORMINO, K. B. N. T. Desenvolvimento e avaliação clínica de um gel facial de própolis vermelha na terapêutica da acne vulgar de grau 1 e 2. 2020. 98 f. Tese (Doutorado em Desenvolvimento e Inovação Tecnológica em Medicamentos) – Faculdade de Farmácia, Odontologia e Enfermagem, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2020.
7. Thiboutot D. Acne: 1991-2001. Journal of the American Academy of Dermatology. 2002;47: 109–117. doi:10.1067/mjd.2002.123483
8. M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, X. Li, M. Caricato, A. Marenich, J. Bloino, B. G. Janesko, R. Gomperts, B. Mennucci, H. P. Hratchian, J. V. Ort and DJF. Gaussian 09W. Wallingford CT: Gaussian, Inc., 2016.
9. Foresman JB, Frisch A. Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods. 3rd ed. Wallingford, CT: Gaussian, Inc.; 2015.
10. Allouche A-R. Gabedit-A graphical user interface for computational chemistry softwares. Journal of Computational Chemistry. 2011;32: 174–182. doi:10.1002/jcc.21600