

ESTUDO QUANTITATIVO ESTRUTURA-PROPRIEDADES (QSPR) DOS PCB'S

Lucicleide R. Cirino (PQ), Márcia M. C. Ferreira* (PQ), José J. V. Cirino** (PQ)

*Instituto de Química, UNICAMP, C.P. 6254, 13081-970, Campinas - SP

**Departamento de Física, ICE, UFJF, Juiz de Fora - MG

E-mail: márcia@iqm.unicamp.br

Bifenis policlorados (PCB's), consistem de 209 congêneros com diferentes números de átomos de cloro em diferentes posições na molécula de bifenil. Devido às suas propriedades físicas os PCB's são largamente utilizados na indústria. Como consequência da sua alta resistência à oxidação e redução e do descarte inapropriado, resultado da crescente contaminação dos componentes do ecossistema global por PCB's. Os PCB's são encontrados no ar, água e solo. A natureza lipofílica e a persistência dos PCB's contribuem para seu alto potencial de bioacumulação nos altos níveis da cadeia alimentar. Isto é, resíduos de PCB's são rotineiramente detectados em peixes e tecido adiposo humano. Nos seres humanos os problemas de saúde que podem ocorrer dependem da dose de exposição. Os PCB's são considerados cancerígenos, além de afetarem o sistema reprodutivo, e causarem danos irreversíveis em filhos de mulheres que sofreram algum tipo de exposição.

No estudo do impacto ambiental de uma substância tóxica, é importante conhecer as propriedades da mesma. O estudo de PCB's é limitado porque apesar da possibilidade de sintetizar todos os PCB's, muitos não o são em quantidades suficientes para se fazer uma análise experimental de suas propriedades físicas, desta forma, há grandes dificuldades em se obter muitas das propriedades de vários PCB's, e a literatura é escassa em relação a estes dados. Daí a importância da construção de modelos e previsão das mesmas.

Neste trabalho apresentamos um estudo QSPR (Quantitative Structure-Properties Relationship) para relacionar as propriedades físico-químicas de PCB's com descritores eletrônicos, estéricos e topológicos. As propriedades estudadas foram, o coeficiente de partição carbono-água, pressão de vapor, solubilidade em água, constante da lei de Henry, coeficiente de atividade aquosa e ponto de fusão. Com a utilização de análise por componentes principais (PCA) e regressão por mínimos quadrados parciais (PLS) foi possível a partir dos dados experimentais disponíveis na literatura, elaborar modelos de previsão para os demais congêneros. As geometrias moleculares utilizadas na obtenção dos parâmetros eletrônicos, estéricos e topológicos, foram obtidas após análise conformacional utilizando-se o método semi-empírico AM1. Os descritores foram calculados com os programas Spartan5 e POLLY.

(CNPq, CENAPAD-SP)