

Química

## **Estudo teórico da inclusão dos inseticidas Hexaflumuron, Diflubenzuron e Novaluron em Beta-Ciclodextrina**

Erick Ferreira Lacerda - 4º módulo de Química, UFLA, iniciação científica voluntária.

Cleber Paulo Andrada Anconi - Orientador, DQI, UFLA. - Orientador(a)

Gleicy Teixeira - 7º módulo de Química, UFLA, iniciação científica voluntária.

### **Resumo**

A tecnologia agropecuária evolui ao passo que são pesquisados e compreendidos novos meios de controle e produção relacionados à área, bem como suas metodologias. No meio agrônomo, um principal fator contribuinte para o sucesso em termos de aproveitamento de colheitas é a escolha dos agroquímicos aplicados. Bem como diversos benefícios estão atrelados ao uso de inseticidas, há também contrapontos. Dentre os inseticidas atuais se destacam as benzoiluréias que possuem baixa solubilidade em água, alta estabilidade no meio ambiente e também alta toxicidade entre humanos e outros animais. Uma vez dispersos no meio ambiente, esses compostos perduram por muito tempo até sua degradação. Ciclodextrinas (CDs) são da família de macromoléculas capazes de encapsular outros compostos, uma vez que possuem monômeros que formam cones vazados truncados possuindo um exterior hidrofílico (que formam interações fortes com o solvente) e paredes internas hidrofóbicas (que formam interações fortes com o guest, no caso, o pesticida). Dessa forma, são obtidos compostos de inclusão ou host-guest systems. O objetivo deste trabalho é estimar constantes de equilíbrio da formação de compostos de inclusão mediante o uso do método quântico semiempírico GFN2-xTB, considerando a abordagem de equilíbrios simultâneos, a partir da inclusão dos seguintes agroquímicos inseticidas da classe das benzoiluréias: Hexaflumuron (HFM), Diflubenzuron (DIF) e Novaluron (NOV) em Beta-Ciclodextrina (Beta-CD). Mediante uso do software UD-APARM, 372 sistemas supramoleculares de partida foram obtidos para cada benzoiluréia e Beta-CD, com variação de distância de 0 a 12 Å em 15 passos e rotações de 60°, em cinco passos, em relação à cavidade da Beta-CD, ao longo do eixo de inclusão. A partir do estudo dos sistemas otimizados, foi possível identificar as geometrias que termodinamicamente coexistem em equilíbrio e realizar os cálculos das constantes de equilíbrio ( $k$ ) para a inclusão de cada agroquímico em Beta-CD. Os valores teóricos de  $\log K$  obtidos em fase aquosa correspondem a 4,42, 5,99 e 5,31 para a inclusão de HFM, DIF e NOV, em BCD, respectivamente. Finalmente, os dados teóricos atestam que distintas geometrias de inclusão contribuem para a obtenção das constantes de equilíbrio estimadas.

Palavras-Chave: UD-APARM, Ciclodextrina, Benzoiluréias.

Link do pitch: [https://www.youtube.com/watch?v=E\\_coQF3xEp4](https://www.youtube.com/watch?v=E_coQF3xEp4)