

Química

**Estudo teórico da inclusão dos pesticidas Propanil, Linuron, Diuron e Neburon em BetaCD.**

Júlia Alves Ferreira - 1º módulo de Química Bacharelado, UFLA, bolsista PIBIC/UFLA

Carolina Lúcia Cardoso Ribeiro - 4º módulo de Química Licenciatura, UFLA, bolsista PIBIC/UFLA

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

**Resumo**

As ciclodextrinas (CDs) são oligossacarídeos cíclicos produzidos pela degradação do amido, sua estrutura apresenta o exterior hidrofílico e uma cavidade hidrofóbica capaz de hospedar uma ampla gama de moléculas orgânicas. Esses compostos se mostraram eficientes como agente de complexação de pesticidas, sendo possível determinar as constantes de formação de compostos de inclusão entre ciclodextrinas e pesticidas. O objetivo desse trabalho foi obter mediante uso do método quântico GFN2-xTB as constantes de formação dos compostos de inclusão estruturados com Beta-CD e os pesticidas Diuron (DIUR), Neburon (NEBU), Propanil (PROP) e Linuron (LINU). Cada sistema foi estudado considerando 300 sistemas supramoleculares de partida, totalizando 1200 geometrias iniciais. O programa UD-APARM foi empregado na construção desses sistemas. Após otimizações e determinação de energia livre de Gibbs em fase condensada, foram obtidos valores para log K para os compostos de inclusão DIUR@Beta-CD, NEBU@Beta-CD, PROP@Beta-CD, LINU@Beta-CD. Os valores de log k obtidos correspondem a 5.03, 4.72, 6.38 e 3.50, para os compostos de inclusão citados, respectivamente. Como conclusão, foi identificado que a tendência teórica obtida, para ser definitivamente comparada aos dados experimentais, implicará em varredura ampliada da superfície de energia potencial (PES), tendo em vista que a ordem experimental não foi completamente obtida a partir da otimização dos sistemas investigados.

Palavras-Chave: ciclodextrinas, constantes de formação , GFN2-xTB.

Instituição de Fomento: UFLA

Link do pitch: <https://youtu.be/bBqkykRg0IQ>