

Química

## **Estudo teórico da Inclusão de ésteres de ácido ftálico em ciclodextrinas**

ERICK FERREIRA LACERDA - 7º módulo de Química (Bacharel), UFLA, bolsista de iniciação científica.

GLEICY TEIXEIRA - 10º módulo de Química (Bacharel), UFLA, iniciação científica voluntária.

CLEBER PAULO ANDRADA ANCONI - Orientador DQI, UFLA. - Orientador(a)

### **Resumo**

Os ésteres derivados dos ácidos ftálicos, tais como Di-n-butil ftalato (DBP), Dimetil ftalato (DMP) e Di-n-propil ftalato (DPP), são compostos químicos de considerável importância em diversas aplicações industriais, tais como plastificação, ação retardadora de chamas, fixação de fragrâncias e uso como solventes. Devido à ausência de ligações químicas entre os ftalatos e o polímero PVC, esses compostos têm a capacidade de serem lixiviados de produtos sólidos durante sua utilização ou após o descarte, o que os torna relevantes poluentes ambientais com persistência substancial no ambiente após sua dispersão [1]. Ciclodextrinas (CDs), como a alfa-CD demonstram a habilidade de formar sistemas supramoleculares que apresentam maior solubilidade em relação às espécies individuais que foram inclusas. Este estudo tem como objetivo estimar as constantes de equilíbrio associadas à formação de complexos de inclusão, utilizando o método quântico semiempírico GFN2-xTB [3]. Esta abordagem se baseia em equilíbrios simultâneos e se concentra na inclusão dos ésteres dos ácidos ftálicos Di-n-butil ftalato (DBP), Dimetil ftalato (DMP) e Di-n-propil ftalato (DPP), em Alfa-Ciclodextrina (Alfa-CD). Por meio do software UD-APARM [4], foram obtidos 1188 sistemas supramoleculares iniciais para cada éster e Alfa-CD, variando a distância de 0 a 8 Å em 16 passos e as rotações em 20 graus até completar uma rotação completa (360 graus), em relação à cavidade da Alfa-CD, ao longo do eixo de inclusão. A rotação relativa do guest em relação à inclusão (representada pelo ângulo de Euler Beta) também foi alterada. Os sistemas foram otimizados em condições de vácuo e em solução. Os dados processados possibilitaram a determinação teórica das constantes de equilíbrio para a formação de complexos de inclusão. A partir da análise dos sistemas otimizados, foi viável identificar as geometrias termodinamicamente equilibradas e realizar os cálculos das constantes de equilíbrio (K) para a inclusão de cada éster na Alfa-CD. Os valores teóricos de log K obtidos em fase aquosa foram de 3,33, 4,52 e 2,72 para a inclusão de DBP, DMP e DPP, respectivamente, na Alfa-CD. Os dados teóricos contemplam a contribuição de diferentes geometrias de inclusão para a obtenção das constantes de equilíbrio estimadas. No entanto, novos cálculos devem ser efetuados para obtenção de melhor correlação de dados teóricos aos experimentais.

Palavras-Chave: termodinâmica, estudo teórico, UD-APARM.

Instituição de Fomento: PIBIC/CNPq (IC)

Link do pitch: <https://youtu.be/fN62tASVkJM>