

Química

## ÁCIDO MADÉLICO E SEUS COMPOSTOS MANDELATOS DE FE(II), CO(II) e NI(II)

Ana Luiza Augusta de Moura - 7º módulo de Química Bacharelado, UFLA, bolsista PIBIC/CNPq

Leticia Vitoria Miranda - 1º módulo de mestrado em Agroquímica, UFLA, CNPq.

Claudinei Júnior Coutinho Correa - 8º módulo de Química Licenciatura, UFLA, PIVIC/UFLA

Katia Júlia de Almeida - Orientadora DQI, UFLA - Orientador(a)

### Resumo

O ácido madélico (AM) é um composto Alfa-hidroxicarboxílico aromático, frequentemente utilizado como agente antimicrobiano de amplo espectro contra infecções do trato urinário e na indústria de cosméticos, no tratamento de distúrbios da pele, como acne e melasma.<sup>1,2</sup> No presente trabalho, foram realizados cálculos baseados na teoria do funcional de densidade (DFT), B3LYP/CBSB7, com objetivo de otimizar as estruturas moleculares do AM e de todos seus possíveis compostos mandelatos de Fe(II), Co(II) e Ni(II). Os principais resultados indicam que a estrutura desprotonada do AM é a mais estável em solução aquosa. Os espectros de IV e UV-Vis calculados de ambas as espécies do AM demonstraram uma concordância satisfatória com seus respectivos espectros medidos experimentalmente. Os modos de coordenação mono e bidentado foram considerados nas interações diretas entre cada íon de metal de transição e diferentes números de ligantes MA, que foram variados de um a quatro. Dentre os compostos mandelatos otimizados, a estrutura M-4CO<sub>2</sub>O<sub>1</sub>H com 4 ligantes AM apresentou, nos caso dos íons Fe(II), Ni(II) e Co(II), os maiores valores de energia de ligação. Isso indica, que o efeito quelato nos compostos otimizados tem um fator determinante para a estabilidade e reatividade dos complexos formados. As propriedades de ligações químicas obtidas nos cálculos NBO apontam as maiores contribuições dos orbitais atômicos na formação das ligações químicas M-L, contribuindo assim, para um melhor entendimento das propriedades moleculares e de reatividade química desses compostos. Tais resultados mostram ser importantes, devido à dificuldade de obter esse tipo de informação através de medidas experimentais. De modo geral, os resultados obtidos neste trabalho fornecem novas informações para a química dos compostos mandelatos de Fe(II), Co(II) e Ni(II), que apresentam diferentes aplicações nas indústrias química, biológica e farmacêutica.

Palavras-Chave: ácido-madélico, mandelatos, DFT, IV, UV-Vis, DFT, IV, UV-Vis.

Instituição de Fomento: UNIVERSIDADE FEDERAL DE LAVRAS

Link do pitch: <https://youtu.be/tflhXGz-HZc>