

Química

Abordagem teórica de compostos de inclusão formados por ciclodextrinas e o defensivo agrícola paraoxon

Carolina Lúcia Cardoso Ribeiro - 2º módulo de Química, UFLA, bolsista PIBIC/UFLA.

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

Resumo

As ciclodextrinas (CDs) são úteis na formação de compostos de inclusão e tem grande potencial para modificar a solubilidade de determinadas substâncias. Interação também com defensivos agrícolas tóxicos como os organofosforados. A formação de compostos de inclusão pode promover a retirada de material contaminante de um meio. Nesse contexto se insere a abordagem teórica. No entanto, testar e desenvolver a metodologia constituiu etapa relacionada à aplicabilidade da abordagem teórica. A presente pesquisa teve como objetivo específico o estudo da formação de compostos de inclusão entre CDs e o defensivo agrícola paraoxon. Para isso foram obtidas diversas disposições espaciais dos compostos de inclusão formados por paraoxon beta-CD a partir da execução do software para trato de sistemas supramoleculares, desenvolvido pelo orientador e coordenador do Laboratório de Química Fundamental (LQF), o UD-APARM. Em sequência foi investigada a resposta do método xTB, considerando os dados experimentais para esses sistemas. Ao total foram realizadas 126 otimizações, sendo 63 para orientação (+) e 63 para otimização (-), considerando o método semiempírico xTB e o solvente contínuo ALPB, para o sistema formado entre PRX e Beta-CD. O sistema com valor mais negativo foi submetido a cálculo de energia livre de Gibbs. Os dados preliminares obtidos indicam que o xTB quando aplicado sobre conjunto de sistemas supramoleculares gerados pelo UD-APARM fornece boa estimativa da energia livre de Gibbs dos sistemas reais. Novos cálculos serão realizados contemplando a inclusão do PRX em Alfa-CD tendo em vista que dados experimentais possam ser comparados aos estimados teoricamente. Até o momento da pesquisa, foi possível, a partir das 126 otimizações obter ΔG° teórico muito próximo ao determinado experimentalmente, para sistema PRX@ Beta-CD. Sendo ΔG° igual a -2.8 kcal/mol, o valor mais favorável para formação do composto de inclusão. Essa abordagem é relevante pois pode proporcionar o estudo sobre interação dos sistemas supramoleculares sem custos de reagentes ou custos ambientais e em momento anterior ao preparo experimental.

Palavras-Chave: Compostos de inclusão, Ciclodextrinas, Paraoxon.

Instituição de Fomento: PIBIC/UFLA

Link do pitch: <https://www.youtube.com/watch?v=NGpFlrG6c18>