

Química

Estudo teórico GFN2-xTB da inclusão de Linuron, Diuron e Neburon em Beta-CD

Carolina Lúcia Cardoso Ribeiro - 3 módulo de Química, UFLA, bolsista PIBIC/UFLA.

Júlia Alves Ferreira -

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

Resumo

Ciclodextrinas (CDs) são oligossacarídeos cíclicos formados através da degradação do amido. Sua estrutura compreende um exterior hidrofílico e uma cavidade hidrofóbica que pode acomodar moléculas orgânicas distintas. Esses compostos demonstraram eficácia como agentes complexantes de pesticidas. Experimentalmente, foi relatada a determinação de constantes de formação para complexos de inclusão entre ciclodextrinas e pesticidas. Cada sistema foi estudado, considerando 300 e 792 sistemas iniciais supramoleculares. O programa UD-APARM foi empregado na construção destes sistemas. O método GFN2-xTB foi utilizado para obtenção dos dados teóricos. Após otimizações e determinação da energia livre de Gibbs na fase condensada, foram obtidos valores de log K para os compostos de inclusão DIUR@Beta-CD, NEBU@Beta-CD e LINU@Beta-CD em um escopo multi-equilíbrio. Os valores logarítmicos da constante de formação aumentaram com uma faixa de varredura mais ampla. No entanto, a tendência experimental não foi alcançada. A Superfície de Energia Potencial (PES) será mais explorada, uma vez que a abordagem fornece resultados razoáveis. Os valores logarítmicos da constante de formação aumentaram com uma faixa de varredura mais ampla. A tendência experimental não foi alcançada e a exploração adicional do PES GFN2-xTB deve ser realizada.

Palavras-Chave: Pesticidas , Ciclodextrinas , GFN2-xTB.

Instituição de Fomento: Universidade Federal de Lavras

Link do pitch: <https://m.youtube.com/watch?v=BGzJz4x2RQ0>