

Química

Estudo teórico da inclusão de xantona em BetaCD em diferentes temperaturas

Gabriel Maciel Rezende - 7º módulo de Química (Bacharel), UFLA, iniciação científica voluntária.

Leonardo Makoto Mizuno - 1º módulo de Química (Bacharel), UFLA, iniciação científica voluntária.

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

Resumo

Com propriedades anti-inflamatórias, anticancerígenas e antioxidantes, a xantona é uma substância orgânica com grande potencial para aplicações médicas e farmacêuticas. Para otimizar a eficácia das xantonas e alterar sua solubilidade, utiliza-se ciclodextrinas, que são compostas por unidades de glicose dispostas em um anel. As ciclodextrinas possuem uma cavidade interna hidrofóbica e uma superfície externa hidrofílica, permitindo a formação de compostos de inclusão com outras substâncias, como a xantona. Ao encapsular a xantona em sua cavidade, ocorre a formação de um sistema supramolecular com propriedades distintas da substância isolada. No presente estudo, utilizando o método quântico semiempírico GFN2-xTB, foi investigada a formação do composto de inclusão entre a xantona e a Beta-ciclodextrina (Beta-CD) em diferentes temperaturas (10°C, 30°C e 50°C), com o objetivo de compreender melhor a eficácia dessa combinação sob diversas condições, mediante a comparação das constantes de formação dos compostos de inclusão. A abordagem adotada foca nos equilíbrios simultâneos relacionados à inclusão da xantona na beta-ciclodextrina (B-CD) em três temperaturas distintas. Por meio do software UD-APARM, foram gerados 378 sistemas supramoleculares iniciais para cada combinação de xantona e B-CD. A distância entre os centros de massa foi variada de 0 a 5 Å em 10 passos. Além disso, a rotação da xantona em relação à cavidade da B-CD foi ajustada de 0 a 180 graus ao longo do eixo de inclusão, e a rotação relativa do guest, indicada pelo ângulo de Euler Beta, também foi alterada. A otimização dos sistemas foi realizada tanto em condições de vácuo quanto em solvatação implícita. 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 possível observar que a tendência experimental foi reproduzida pela abordagem teórica. Em termos de $\log K$, os valores 6,25, 5,36 e 5,01, foram obtidos para as temperaturas de 10, 30 e 50°C, respectivamente. No entanto, novos cálculos devem ser efetuados para obtenção de melhor correlação de dados teóricos aos experimentais.

Palavras-Chave: Estudo Teórico , Compostos de Inclusão, , UD-APARM.

Instituição de Fomento: UFLA

Link do pitch: <https://youtu.be/IDVx-hOgGR0>