

Química

Estudo teórico da inclusão de herbicidas em ciclodextrinas naturais ou modificadas

Paulo Henrique Bento Ramos - 5º módulo de Química Bacharelado, UFLA, bolsista PIBIC/UFLA.

Carolina Lúcia Cardoso Ribeiro - 4º módulo de Química Bacharelado, UFLA.

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

Resumo

Pesticidas são definidos como substâncias que possuem a intenção de prevenir, repelir ou mitigar qualquer praga (insetos ou microrganismos, por exemplo). Com um desenvolvimento e uso intensivo após a Segunda Guerra Mundial, o seu uso se expandiu para além da agricultura. Esses compostos têm sido empregados em florestas, parques, saúde pública, entre outros. Devido ao seu emprego em larga escala ao passar dos anos, sua utilização vem acarretando e gerando discussões sobre como tem afetado o meio ambiente e a saúde humana. Com isso, várias medidas vêm sendo estudadas com o propósito de remover tais poluentes do solo. A complexação com ciclodextrinas (CDs) vem ganhando espaço nos últimos anos devido a sua capacidade de alojar a substância em sua cavidade, facilitando a remoção de substâncias pouco solúveis do solo. CDs são carboidratos obtidos pela ação de bacilos sobre amido. Existem três tipos de CDs possuindo, respectivamente, seis, sete e oito unidades de glucopiranosose denominadas alfa-, beta- e gama-CD. O presente estudo tem como objetivo investigar a inclusão de pesticidas em beta-CD. Teoricamente foram obtidos em dois scans distintos, 1968 e 2376 sistemas supramoleculares formados com beta-CD e os pesticidas diuron, linuron e neburon. Foi utilizado o software UD-APARM na construção destes sistemas. Em seguida, o método quântico GFN2-xTB foi utilizado para a obtenção dos dados teóricos. Nota-se um aumento nos valores da constante de formação com uma faixa de varredura mais ampla. Os valores do log K obtidos pelo estudo teórico foram de 6,73, 6,59, e 5,29 para a inclusão de diuron, neburon e linuron em beta-CD, respectivamente, para o scan efetuado com maior número de sistema de partida. Após a análise dos sistemas otimizados, a tendência experimental não foi observada. Com isso, será estudada a relação destes compostos com outros dados experimentais para encontrar melhor correlação entre valores teóricos e experimentais.

Palavras-Chave: Pesticida, Ciclodextrina, Estudo Teórico.

Instituição de Fomento: UFLA

Link do pitch: <https://youtu.be/W06GqZ-ATuw>