

Química

Estudo Computacional da Inclusão de Vitaminas em Estudo Computacional da Inclusão de Vitaminas em Beta-Ciclodextrina

Sofia Gonzaga de Andrade - 6º módulo de Química (Bacharel), UFLA, iniciação científica voluntária

Gabriel Maciel Rezende - 1º módulo de Programa de Pós-Graduação Multicêntrico em Química de Minas Gerais (PPGMQ-MG), UFLA.

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

Resumo

Neste estudo, investigou-se a inclusão das formas ionizadas e neutras dos ácidos ascórbico (ASC) e nicotínico (NIC) em Beta-ciclodextrina (Beta-CD) por meio do método semiempírico GFN2-xTB, no contexto da abordagem de múltiplos equilíbrios (Computational and Theoretical Chemistry 1217, 113916, 2022). A solvatação foi modelada pelo contínuo ALPB (água). As estruturas moleculares foram obtidas de diferentes fontes: o NIC foi construído manualmente; o ASC, extraído de dados cristalográficos de raios X (J. Appl. Crystallogr. 52, 445, 2019); e a Beta-CD, também obtida por cristalografia de raios X (Acta Crystallogr. E65, o3162?o3163, 2009), foi inicialmente otimizada no nível GFN2-xTB. As geometrias supramoleculares foram geradas com o software UD-APARM, resultando em 1512 sistemas iniciais (378 por par hóspede/hospedeiro), variando sistematicamente distância e orientação relativas. Cada sistema, contendo guests neutros ou ionizados, foi totalmente otimizado em GFN2-xTB. Estruturas com frequências imaginárias ou inválidas foram descartadas, e as geometrias válidas utilizadas no cálculo das energias livres de ligação, a partir das quais se derivaram as constantes de associação (log K). Os resultados indicaram que as formas ionizadas apresentaram interações mais fortes com a Beta-CD, refletidas em valores calculados de log K mais elevados (NIC@Beta-CD: 7.14; ASC@Beta-CD: 5.84). Entretanto, apenas os complexos neutros reproduziram a tendência experimental (Saha et al., Scientific Reports, 6: 35764, 2016), evidenciando que $\log K(\text{ASC@Beta-CD}) > \log K(\text{NIC@Beta-CD})$ no nível GFN2-xTB (ALPB). Experimentalmente, os valores foram: NIC@Beta-CD, $K_c = 1.498 \times 10^3 \pm 0.155 \text{ M}^{-1}$ (log $K_c = 3.18$), ASC@Beta-CD, $K_c = 3.655 \times 10^3 \pm 0.335 \text{ M}^{-1}$ (log $K_c = 3.56$).

Palavras-Chave: Complexos de Inclusão, Estudo Computacional da Inclusão de Vitaminas em Beta-Ciclodextrina, Vitaminas.

Instituição de Fomento: PIVIC

Link do pitch: <https://youtu.be/cF8AjfniD8Y>