

Química

**Estudo Teórico da Inclusão de Derivados para-substituídos do tert-butilbenzeno em Beta-Ciclodextrina**

Paulo Henrique Bento Ramos - 8º módulo de Química Bacharelado, UFLA, bolsista PIBIC/UFLA.

Leonardo Makoto Mizuno - 4º módulo de Química Bacharelado, UFLA, PIVIC/UFLA.

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

**Resumo**

Com o avanço da química quântica computacional, foi possível desenvolver novos métodos além de aprimorar aqueles já existentes, tornando-as cada vez mais eficientes para o estudo de sistemas complexos. Ciclodextrinas (CDs) são carboidratos obtidos pela ação de bacilos sobre amido. Existem três tipos de CDs possuindo, respectivamente, seis, sete e oito unidades de glucopiranoose denominadas alfa-, beta- e gama-CD. Elas possuem uma camada interna que é em sua maior parte hidrofóbica permitindo uma maior interação com moléculas (guest) também hidrofóbicas. Diferentes tipos de guest podem ser complexados em sua cavidade, ocorrendo uma interação host-guest, denominados compostos de inclusão. A complexação com CDs auxilia em diversos tipos de aplicações, como a solubilização e direcionamento de fármacos, dispersão de cosméticos, a catálise e as separações cromatográficas. No presente estudo, o software UD-APARM foi utilizado na construção dos sistemas supramoleculares, 1800 sistemas de partida. Em seguida, esses sistemas foram analisados através do método quântico semi empírico GFN2-xTB para a obtenção de dados teóricos. Através da metodologia desenvolvida, as constantes de equilíbrio teóricas são obtidas e então comparadas com dados experimentais. Contudo, aplicar essa metodologia em sistemas que possuem carga ainda é um desafio. Logo, esta pesquisa tem como objetivo investigar a inclusão de derivados do tert-butilbenzeno, carregados e neutros, em beta-ciclodextrinas. Os valores preliminares do log K obtidos até este momento pelo estudo teórico foram de 9,72 e 10,72 para dois derivados do tert-butilbenzeno sendo eles o ou 4-terc-butil-dimetilanilina com carga positiva (+1) e ácido p-terc-butilbenzoico com carga negativa (-1), respectivamente. A análise dos outros derivados do tert-butilbenzeno, carregados e neutros, segue ocorrendo a fim de que possa ser feito um melhor levantamento de dados teóricos. Com isso, será estudada a relação destes compostos com os dados experimentais para encontrar melhor correlação. Após o término do estudo, um artigo será gerado para publicação.

Palavras-Chave: Química Computacional, Ciclodextrina, Estudo Teórico.

Instituição de Fomento: UFLA

Link do pitch: <https://youtu.be/NvCLqxf3gz8>