

Química

Interação do ácido para-aminobenzóico, o PABA, com ciclodextrinas alfa e beta

Carolina Lúcia Cardoso Ribeiro - Carolina Lúcia Cardoso Ribeiro

Gabriel Maciel Rezende - Pós-Graduação Multicêntrico em Química de Minas Gerais

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

Resumo

O ácido para-aminobenzóico (PABA), derivado do ácido benzóico com grupo amino na posição para, é produzido por microrganismos e plantas, sendo amplamente utilizado na proteção contra radiação UV. O interesse científico nesse composto decorre da possibilidade de modificação de suas propriedades em novas formulações. A complexação com ciclodextrinas (CDs) tem sido explorada experimentalmente, enquanto abordagens teóricas recentes, como o método semiempírico GFN2-xTB e a automação supramolecular pelo software UD-APARM, permitem avaliar equilíbrios múltiplos em compostos de inclusão. Este trabalho investigou a interação do PABA com Alfa- e Beta-CD, além do ácido benzóico, por meio da comparação entre dados teóricos e experimentais. Estruturas iniciais obtidas pelo UD-APARM foram otimizadas com GFN2-xTB, possibilitando a análise dos modos de inclusão e da distribuição populacional do PABA em função do pH. No total, foram avaliados 380 sistemas supramoleculares para PABA@Alfa-CD e 380 para PABA@Beta-CD. Pelo estudo teórico com GFN2-xTB, foram obtidos valores de $\log K = 2,49$ (Beta-CD), que, apesar de inferiores aos experimentais, ainda atendem a uma boa expectativa de afinidade, refletindo coerência com a tendência observada. Já para a Alfa-CD, o valor teórico de $\log K = 1,84$ indicou perda mais acentuada da estabilidade do complexo, mostrando maior discrepância em relação ao experimental. Esses desvios evidenciam limitações ligadas à amostragem conformacional. Assim, embora os cálculos com GFN2-xTB apresentem tendências próximas às experimentais, ainda se mostram inconclusivos, reforçando a necessidade de varreduras mais amplas e da consideração de múltiplas configurações moleculares.

Palavras-Chave: Ácido para-aminobenzóico , Ciclodextrinas , Complexação supramolecular .
Instituição de Fomento: Universidade Federal de Lavras

Link do pitch: <https://youtu.be/C4fUv9OBKoU?feature=shared>