

Química

### **Estudo teórico da inclusão do pesticida paraoxon em ciclodextrinas**

Carolina Lúcia Cardoso Ribeiro - 4 módulo de Química licenciatura, UFLA, bolsista PIBIC/UFLA.

Jonathan Campos Marcelino - Pós graduação - Multicêntrico em Química de Minas Gerais; 3 semestre

Gleicy Teixeira - 7 módulo de Química bacharelado, UFLA.

Erick Ferreira Lacerda - 4 módulo de Química bacharelado, UFLA.

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

#### **Resumo**

As ciclodextrinas (CDs) são úteis na formação de compostos de inclusão e apresentam grande potencial para modificar a solubilidade de determinadas substâncias. Interagem também com defensivos agrícolas tóxicos como os organofosforados. A formação de compostos de inclusão pode promover a retirada de material contaminante de um meio. Nesse contexto se insere a abordagem teórica. No entanto, testar e desenvolver a metodologia constituiu etapa relacionada ao estudo da aplicabilidade da abordagem teórica. A presente pesquisa teve como objetivo específico o estudo da formação de compostos de inclusão entre CDs e o defensivo agrícola paraoxon. Para isso foram obtidas diversas disposições espaciais dos compostos de inclusão formados por PRX@Alfa-CD, PRX@Beta-CD e PRX@Gamma-CD, a partir da execução do software. Em sequência foi investigada a resposta do método GFN2-xTB, considerando os dados experimentais para esses sistemas. Ao total foram investigados 1200 sistemas sendo (300 por par: pesticida/CD) para PRX@Alfa-CD, e PRX@Beta-CD e 600 para PRX@Gamma-CD, considerando o método semiempírico GFN2-xTB. A partir dos 1200 sistemas investigados, foi possível identificar as geometrias em equilíbrio e realizar os cálculos das constantes de equilíbrio (K) para PRX@Alfa-CD, PRX@Beta-CD e PRX@Gamma-CD. Os valores teóricos de logK (GFN2-xTB) obtidos correspondem a 4.18, 6.48 e 8.82, respectivamente. Em comparação com dados experimentais, indica-se que os valores obtidos teoricamente estão superestimados e os mesmos, possibilitam comparação e diferenciação entre PRX@Alfa-CD e PRX@Beta-CD, assim como PRX@Alfa-CD e PRX@Gamma-CD, pois conforme dados experimentais, compostos com ACD apresentam valor menor de logK. No entanto, não foi possível diferenciar corretamente PRX@Beta-CD de PRX@Gamma-CD. Essa abordagem pode ser considerada relevante pois pode proporcionar o estudo sobre a interação dos sistemas supramoleculares sem custo de reagentes ou custos ambientais e em momento anterior ao preparo experimental.

Palavras-Chave: Compostos de inclusão, Ciclodextrinas, Paraoxon.

Instituição de Fomento: PIBIC-UFLA

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