

Núcleo de Avaliação: Núcleo II

Área temática: Engenharia Química

Área do Conhecimento: Engenharia de Separações e Termodinâmica

Estudo Computacional para Seleção de Monômeros na Síntese de Polímeros Molecularmente Impressos Aplicados à Extração de Quercetina

Talita Rebouças de Araújo Cortez, Francisco Wilton Miranda da Silva, Rafael Barbosa Rios

Os polímeros molecularmente impressos (Molecularly Imprinted Polymers – MIPs) são materiais sintéticos capazes de reconhecer seletivamente moléculas específicas, atuando como receptores artificiais baseados no princípio “chave-fechadura”. Devido à sua alta seletividade, estabilidade e baixo custo, apresentam ampla aplicação em processos de purificação, biossensoriamento e detecção de compostos bioativos. Entre os compostos cuja extração e purificação justificam o uso de MIPs, destaca-se a quercetina, um flavonoide de relevância farmacológica e alimentar, reconhecido por suas propriedades antioxidantes e anti-inflamatórias. Di Giulio et al. (2025) (DOI: 10.1021/acsami.4c21238) desenvolveram um MIP de polipirrol para o reconhecimento seletivo da quercetina, combinando simulação computacional e experimentação. Com base nesse estudo, o presente trabalho teve como objetivo validar a metodologia computacional empregada, reproduzindo as simulações do complexo pirrol–quercetina para, posteriormente, aplicá-la na seleção de novos monômeros a serem utilizados na síntese de MIPs voltados à extração seletiva da quercetina como analito. Na metodologia de Di Giulio et al. (2025), as simulações foram realizadas nos softwares Gaussian 16W e GaussView 6.1, empregando a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) com o funcional B3LYP e o conjunto de base 6-311++G(d,p). O cálculo da energia de interação (ΔE) foi utilizado como critério para a seleção do monômero mais promissor, sendo $\Delta E = E_{\text{complexo}} - (E_{\text{quercetina}} + E_{\text{monômero}})$, em que valores mais negativos indicam maior estabilidade e afinidade entre as espécies. Seguindo essa estratégia, as moléculas isoladas de pirrol e quercetina foram otimizadas com sucesso, confirmando sua estabilidade estrutural. No entanto, a otimização do complexo não convergiu, impedindo o cálculo das energias de interação e análises subsequentes. As dificuldades observadas foram atribuídas à complexidade do sistema e limitações computacionais. Apesar disso, os resultados preliminares validam parcialmente a metodologia e indicam possíveis ajustes futuros. Entre as estratégias propostas para contornar esses problemas destacam-se o uso de pré-otimizações com bases menores, e o uso de restrições geométricas. Conclui-se que, embora a validação completa ainda não tenha sido alcançada, o estudo estabeleceu bases teóricas sólidas para o avanço na modelagem de MIPs seletivos para flavonoides, reforçando o potencial das simulações computacionais como ferramenta para o projeto de novos materiais.

Palavras-chave: Simulação Molecular, Polímeros, MIP, Quercetina, Pirrol.

Agência financiadora: PICI-UFRS.

Campus: Mossoró.

