

# Estudo de um sensor colorimétrico para analitos neutros baseado na interação da merocianina de Brooker com $\beta$ -ciclodextrinas

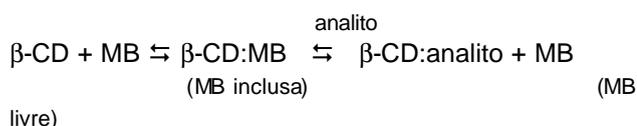
Jaqueline Nicolini (PG), Clodoaldo Machado (PQ), Vanderlei G. Machado\* (PQ) [gageiro@furb.br](mailto:gageiro@furb.br)

Departamento de Química, Universidade Regional de Blumenau, FURB, Blumenau, SC, 89010-971.

Palavras Chave: ciclodextrina, corante, sensor colorimétrico.

## Introdução

A detecção de analitos eletricamente neutros usando-se sensores químicos representa atualmente uma área de investigação de grande interesse, pois há poucos indicadores e ligantes que podem reconhecer moléculas neutras.<sup>1</sup> As ciclodextrinas (CDs) são oligossacarídeos cíclicos que apresentam unidades de glicose interligadas ocupando um espaço semelhante a um cone truncado.<sup>2</sup> Estas moléculas cíclicas são receptores versáteis para uma grande variedade de compostos pelo fato delas apresentarem cavidades hidrofóbicas com o exterior hidrofílico. Foi verificado recentemente que a metil- $\beta$ -CD forma um complexo de inclusão em água com a merocianina de Brooker (MB), um indicador solvatocrômico bastante conhecido.<sup>3</sup> Os corantes solvatocrômicos são compostos que, ao se mudar a polaridade do meio, mudam sua coloração. Esta mudança pode ser detectada visualmente ou por meio da técnica de UV/vis.<sup>3</sup> Assim, pensamos que uma diferença de coloração envolvendo a MB incluída na CD e livre em solução poderia ser empregada na montagem de um sensor para moléculas neutras em água. Este sensor se baseia em um método de substituição do indicador, que envolveria a troca do corante na cavidade da CD por um substrato que tenha uma maior afinidade por ela (**Figura 1**). Esta substituição levaria à mudança da cor da solução, a qual poderia ser detectada.



**Figura 1.** Uso da interação CD:MB para montar um sensor colorimétrico para analitos neutros.

## Resultados e Discussão

Foram realizados estudos em água misturando-se a CD ( $\beta$ -CD e metil- $\beta$ -CD) com a MB, conforme esquematizado na **Figura 1**. A seguir, a mistura aquosa foi transferida para uma cubeta de quartzo e termostatizada a 25°C em um espectrofotômetro de UV/vis (Varian Cary Bio 50). Foram feitas adições crescentes de diferentes substratos (fenol, tolueno, benzeno e álcool benzílico) e os espectros foram coletados a fim de se determinar as suas constantes de inclusão usando-se o método espectrofotométrico. A concentração da  $\beta$ -CD foi de  $7 \times 10^{-3}$  mol.dm<sup>-3</sup>, da

metil- $\beta$ -CD 0,03 mol.dm<sup>-3</sup> e da MB  $1 \times 10^{-5}$  mol.dm<sup>-3</sup>. Sendo os substratos apolares, utilizou-se metanol para preparar estas soluções. Nas condições experimentais, o metanol adicionado não traz mudanças espectrais ao complexo CD:MB. A adição de cada um dos substratos neutros ao complexo MB:CD em água mostrou a presença de um ponto isobéstico, caracterizando um equilíbrio entre duas espécies em solução, isto é, o corante livre e o complexo  $\beta$ -CD:MB. Isto se deve ao fato de que ao ser substituído o corante no complexo, ele é transferido de um meio de polaridade mais baixa (interior da CD) para outro de polaridade alta (água), levando ao deslocamento hipsocrômico observado. A partir dos dados experimentais, determinaram-se as constantes de inclusão com o uso da equação de Benesi-Hildebrand ( $r^2 > 0,99$ ). Os resultados apresentados na **Tabela 1** demonstram que as constantes de inclusão puderam ser obtidas apresentando uma ordem de magnitude parecida com aquelas encontradas na literatura por meio de diferentes métodos. As diferenças obtidas usando-se a  $\beta$ -CD e a metil- $\beta$ -CD podem ser explicadas pelas suas diferenças estruturais, o que faz com que elas reconheçam os substratos de forma diferenciada.

**Tabela 1.** Constantes de inclusão nas  $\beta$ -CDs a 25°C

Substrato	log $K^a$	log $K^{b,c}$	log $K^{b,d}$
Fenol	3,4	3,25	2,41
Tolueno	–	4,19	3,43
Benzeno	3,23	–	2,81
Álcool benzílico	1,32	2,79	0,821

<sup>a</sup> Referência 2, para  $\beta$ -CD. <sup>b</sup> Este trabalho. <sup>c</sup>  $\beta$ -CD. <sup>d</sup> Me- $\beta$ -CD.

## Conclusões

Os resultados demonstram a viabilidade do método estudado para a obtenção indireta de constantes de inclusão de diferentes substratos neutros com ciclodextrinas por meio do uso da MB como indicador. Além disso, abrem a possibilidade de se estudar o método como uma maneira de se obter sensores eficientes para analitos neutros.

## Agradecimentos

CAPES, FURB e CNPq.

<sup>1</sup>Mohr, G.J. *Chem. Eur. J.* **2004**, *10*, 1082-1090.

<sup>2</sup>Rekharsky, M. V.; Inoue, Y. *Chem. Rev.* **1998**, *98*, 1875-1917.

*Sociedade Brasileira de Química ( SBQ)*

<sup>3</sup>Venturini, C.G.; Andraus, J.; Machado, V.G.; Machado, C.; *Org. Biomol. Chem.* **2005**, 3, 1751-1756.