

Solvatação de Dímeros de β -Ciclodextrina

Christian Blenke* (PG), Geórgia M. A. Junqueira (PQ), Hélio F. dos Santos (PQ)

NEQC, Núcleo de Estudos em Química Computacional, Departamento de Química, ICE, Universidade Federal de Juiz de Fora, Campus Martelos, CEP 36036-900, Juiz de Fora – MG, Brasil. E-mail: christian.blenke@gmail.com

Palavras Chave: Monte Carlo, β -ciclodextrina, Reatores Moleculares.

Introdução

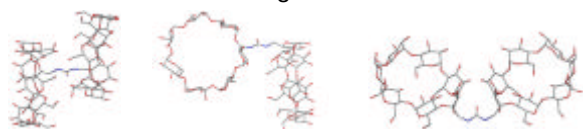
Ciclodextrinas são oligossacarídeos formados por unidades de α -D-glicopiranosose unidas por ligações glicosídicas α -1,4. Uma das formas mais comum é a β -ciclodextrina (β -CD), formada por sete unidades de α -D-glicopiranosose. Existem diferentes CDs modificadas, visando aplicações específicas, dentre as quais um dímero N,N'-Bis-(6^A-deoxi- β -ciclodextrina-6^A-il)-uréia (β -CD₂ur), que têm sido amplamente estudado como reator molecular^{1,2}. Em nosso estudo anterior³, três conformações estáveis foram obtidas, nomeadas C1, C2 e C3 (Fig. 1). No presente estudo o método Monte Carlo foi utilizado visando analisar as interações soluto-solvente. Os resultados obtidos são discutidos em função da forma da molécula e comparados com dados reportados na literatura para α -⁴ e β -ciclodextrinas⁵.

Resultados e Discussão

As estruturas representadas na Fig. 1 foram otimizadas no nível semi-empírico PM3³ e as cargas atômicas obtidas no nível B3LYP/6-31G(d)//PM3. A simulação Monte Carlo consistiu de 20000 passos MC de termalização e 100000 de médias. Uma molécula de soluto e 5000 de solvente foram consideradas como sistema no ensemble NVT. As simulações MC foram realizadas como o programa DICE⁶. A Tabela 1 mostra os resultados obtidos da análise das principais funções de correlação (RDF).

Figura 1. Dímeros C1, C2 e C3.

Os resultados mais relevantes apontam um número médio de moléculas de água dentro de cada cavidade



para os dímeros C1, C2 e C3 iguais a 6,5, 5,6 e 5,6, respectivamente, em acordo com os valores observados para a β -CD livre (6-7)⁵. O número total de ligações de hidrogênio requer que sejam considerados o soluto (dímero) como doador (D) e aceptor (A) de hidrogênio (Tabela 2). Assim, temos um número total de ligações de hidrogênio por átomo de oxigênio igual a 1,4, 1,4 e 1,5 (O7) e 0,7, 0,8 e 0,8 (O4), respectivamente para C1, C2 e C3. Esses resultados estão também em acordo com dados disponíveis para α e β -CD^{4,5}.

Tabela 1. Distâncias interatômicas médias (r_m) e nº de coordenação obtidos através das rdf's para o sistema dímero-água.

g(r)	r_m (?)			Nº de Coordenação		
	C1	C2	C3	C1	C2	C3
	1º Pico	1º Pico	1º Pico			
CM-CM	0,85	-	-	3,3	-	-
XX17-O1	2,05	1,55	2,05	6,9	5,4	5,2
XX18-O1	1,85	1,95	2,15	6,2	5,8	6,0
O4-O1	2,95	2,85	2,85	3,3	2,9	2,8
O4-H2	1,95	1,95	1,95	0,3	0,3	0,3
O5-O1	3,55	2,95	-	0,7	0,1	-
O5-H2	2,05	1,95	2,05	< 0,1	< 0,1	0,1
O6-O1	2,75	2,85	2,75	0,6	0,5	0,6
O6-H2	1,85	1,85	1,75	0,3	0,2	0,3
O7-O1	2,85	2,85	2,85	4,1	4,4	4,0
O7-H2	1,85	1,85	1,95	0,6	0,6	0,6
O15-O1	2,75	2,85	-	1,8	1,3	-
O15-H2	1,85	1,85	-	0,7	0,6	-
N13-O1	3,65	3,35	3,45	3,1	5,6	4,9
H16-O1	2,55	2,75	2,75	1,1	2,9	4,5

Tabela 2. Número de ligações de hidrogênio em cada tipo de oxigênio.

Tipos de O	C1		C2		C3	
	D	A	D	A	D	A
2 ^{ário} (O4)	0,4	0,3	0,5	0,3	0,5	0,3
1 ^{ário} (O7)	0,8	0,6	0,8	0,6	0,9	0,6
Glicosídico (O5)	-	0,1	-	0,1	-	0,1
Piranosídico (O6)	-	0,3	-	0,2	-	0,3

Conclusões

Os estudos de solvatação para os dímeros de β -ciclodextrina através do Método Monte Carlo forneceram resultados em boa concordância com os valores relatados na literatura^{4,5}. Novos estudos estão sendo feito visando avaliar a energia de solvatação das diferentes conformações.

Agradecimentos

FAPEMIG, CNPq, FINEP, PROPESQ-UFJF

¹ C. J. Easton; J. B. Harper; S. F. Lincoln; *New. J. Chem.* (1998) 1163.

² J. B. Harper; C. J. Easton; S. F. Lincoln; *Tetrahedron Lett.* **44**, (2003) 5815.

³ C. Blenke, J. M. A. Junqueira, V. J. Da Silva, W. B. De Almeida, H. F. Dos Santos, *Theochem*, (2007) no prelo.

⁴ H. C. Georg; K. Coutinho; S. Canuto; *Chem. Phys. Letters* **413** (2005) 16.

⁵ T. Heine; H. F. dos Santos; S. Patchkoviskii; H. A. Duarte; *J. Phys. Chem. A* (2007) no prelo.

⁶ K. Coutinho and S. Canuto, DICE: A Monte Carlo program for molecular liquid simulation, University of São Paulo, Brazil (1997).