

Interação hóspede-hospedeiro entre complexos $[Fe(R-tpy)_2](Cl)_2$ (R= tf, ph e Br-ph) e β -ciclodextrinas.

Aline M. C. Assumpção (PG)*, Sérgio H. Toma (PG), Juliano A. Bonacin (PG), Henrique E. Toma (PQ).

Universidade de São Paulo - Instituto de Química, Av. Prof. Lineu Prestes 748, Cidade Universitária, São Paulo –SP CEP 05513-970 *e-mail: alinemca@iq.usp.br

Palavras Chave: β -ciclodextrina, complexos de ferro-terpiridina, interação hóspede-hospedeiro, complexos de inclusão.

Introdução

Ciclodextrinas são oligossacarídeos cíclicos que contem 6(α), 7(β) ou 8(γ) unidades de glicopiranosose formando uma estrutura toroidal com ambas extremidades abertas. Esta característica estrutural permite a entrada de moléculas em seu interior através de uma interação hóspede-hospedeiro¹. A cavidade hidrofóbica da β -ciclodextrina pode acomodar vários tipos de moléculas como, por exemplo, complexos do tipo $[Fe(R-tpy)_2](Cl)_2$ (R= tf, ph e Br-ph). Estes complexos de inclusão podem fornecer várias aplicações em química supramolecular e nanotecnologia².

Resultados e Discussão

Para os estudo de inclusão dos complexos em β -ciclodextrina foram obtidos sucessivos espectros UV-vis de soluções aquosas dos complexos $[Fe(R-tpy)_2](Cl)_2$ (R= tf, ph e Br-ph) adicionando-se alíquotas de solução 0,01 mmol.dm⁻³ de β -ciclodextrina a temperatura constante de 25,0 °C. A figura 1 mostra o espectro eletrônico do complexo $[Fe(tf-tpy)_2](Cl)_2$, e sua variação em função da adição de β -ciclodextrina.

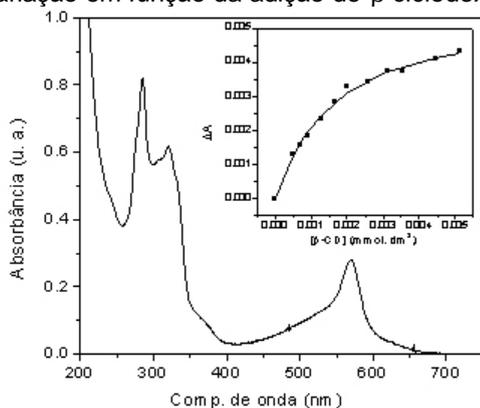


Figura 1. Espectro UV-vis do complexo $[Fe(tf-tpy)_2](Cl)_2$ em água. Gráfico inserido: Ajuste não linear da curva de mudança de absorvância em $\lambda=569$ nm em função da concentração de β -CD.

A figura 2 mostra um esquema ilustrativo da reação de inclusão do complexo em β -ciclodextrina.

As constantes de inclusão $K_{1:1}$ e $K_{1:2}$ foram determinadas diretamente das medidas espectrofotométricas. Foi utilizado um ajuste não linear para se obter os valores das constantes

correspondentes as estequiometrias 1:1 e 1:2 (tabela 1).

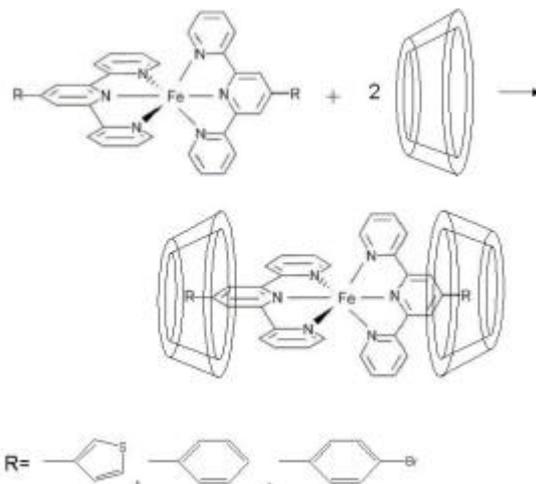


Figura 2. Esquema ilustrativo da reação de inclusão dos complexos $[Fe(R-tpy)_2](Cl)_2$ (R= tf, ph e Br-ph) em β -ciclodextrina.

Tabela 1. Valores das constantes de equilíbrio obtidas utilizando o ajuste dos dados experimentais dos espectros UV-vis dos complexos $[Fe(R-tpy)_2](Cl)_2$ (R: tf, ph e Br-ph).

R	$K_{1:1}$	$K_{1:2}$
tf	621	185
Br-ph	593	206
ph	365	93

Todas as constantes apresentaram concordância maior que 99,5% entre a curva teórica e os dados experimentais.

Acredita-se que a presença dos átomos de S e Br nos anéis aromáticos ligados as terpiridinas provoca mudanças na polaridade dos compostos. Desta forma, a hidrofobicidade dos complexos que apresentam heteroátomos sofre uma modificação de maneira que a inclusão destes complexos em β -ciclodextrina é mais eficiente.

Conclusões

Os resultados confirmam que os complexos $[Fe(R-tpy)_2](Cl)_2$ (R= tf, ph e Br-ph) são boas espécies para inclusão em β -ciclodextrina. Os complexos $[Fe(tf-tpy)_2](Cl)_2$ e $[Fe(Br-ph-tpy)_2](Cl)_2$ apresentaram as maiores constantes, ou seja, a inclusão destes complexos é favorecida.

Agradecimentos

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)

FAPESP, IMMC, RENAMI.

¹ Szejtli J., *Chemical Reviews* **1998**, 98, 1743.

² Toma S. H., Bonacin J. A., Araki K., Toma H. E., *Surface Science* **2006**, 600, 4591.