

# Composto supramolecular de ciclodextrina com o complexo [Cu(HISMIMA)Cl<sub>2</sub>]

Luiz Fernando Brum Malta (PG),<sup>1</sup> Tatiane Pessanha da Silva Pires (IC),<sup>1</sup> Yraima Cordeiro (PQ),<sup>2</sup> Marta E. Medeiros (PQ),<sup>1</sup> Marciela Scarpellini (PQ)<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Química, UFRJ, Rio de Janeiro, RJ. [marciela@iq.ufrj.br](mailto:marciela@iq.ufrj.br)

<sup>2</sup>Faculdade de Farmácia, UFRJ, Rio de Janeiro, RJ

Palavras Chave: supramolecular, complexos de cobre(II), ciclodextrina, nucleases sintéticas, inclusão.

## Introdução

Ciclodextrinas são uma classe de oligossacarídeos que nos últimos anos têm sido utilizadas para diversas aplicações, tais como nas indústrias alimentícia, farmacêutica, química e agricultura. São especialmente adequadas para o desenvolvimento de sistemas de entrega de drogas, por serem capazes de formar complexos hospedeiro-convidado com vários tipos de moléculas. Neste trabalho, busca-se desenvolver uma metodologia adequada para a inclusão do complexo [Cu(HISMIMA)Cl<sub>2</sub>], **1**, que representa uma nova nuclease química com possível aplicação anti-tumoral<sup>1</sup>.

## Resultados e Discussão

A obtenção do composto supramolecular no estado sólido se deu em duas etapas: i) solubilização de quantidades equimolares de **1** e 2-hidroxipropil-β-ciclodextrina (HPCD) em água Milli-Q; ii) evaporação completa do solvente a temperatura ambiente sob agitação magnética. Este complexo foi analisado por Espectroscopia Infravermelho (EI), com resolução 4 cm<sup>-1</sup> bem como a mistura mecânica 1:1 (MM), a HPCD e **1**. Os espectros da mistura mecânica e do composto supramolecular foram subtraídos daquele da HPCD e comparados entre si e com **1**. Para o composto de inclusão verificou-se o desaparecimento da banda de estiramento NH aromático em 3218 cm<sup>-1</sup> e diminuição da banda de estiramento NH alifático em 3120 cm<sup>-1</sup>. Observa-se também que as bandas de estiramento C=C e C=N sofrem deslocamentos com o processo de inclusão de **1** (Tabela 1).

**Tabela 1.** Modificações verificadas na região de estiramento das ligações C=C e C=N com o processo de inclusão.

Composto de inclusão	1575 cm <sup>-1</sup>	1564 cm <sup>-1</sup>	1516 cm <sup>-1</sup>
Mistura Mecânica	1583 cm <sup>-1</sup>	1550 cm <sup>-1</sup>	1510 cm <sup>-1</sup>

Estas modificações evidenciam que o processo de inclusão deva ocorrer através de interações entre o ligante e a HPCD. Para confirmar estas evidências

foram registrados espectros na região do UV-vis mantendo a concentração de **1** constante (1 x 10<sup>-4</sup> M) e variando a concentração de HPCD (10-30 mM). Foram verificadas grandes perturbações, com diminuição de intensidade das bandas em 209 e 240 nm e deslocamento batocrômico da banda em 240 nm. Tais são atribuídas as transições internas dos grupos imidazólicos evidenciando o processo de inclusão por estes grupos.

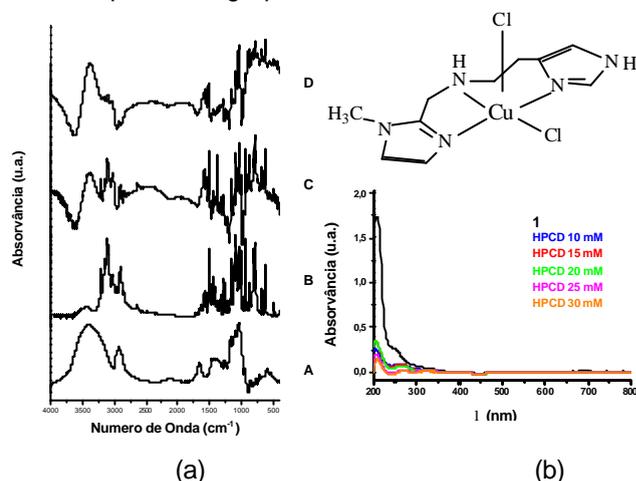


Figura 1: a) Espectros de infravermelho da HPCD (A), **1** (B), MM (C) e Composto de Inclusão (D); e b) Espectros de UV-vis dos sistemas contendo **1** (1x10<sup>-4</sup>M) e HPCD (concentrações indicadas).

Foram realizadas medidas de dicroísmo circular na região do visível utilizando concentração de **1** de 1 x 10<sup>-3</sup> M e concentrações de HPCD de 30 e 60 x 10<sup>-3</sup> M. Não foi verificado dicroísmo induzido relativo a transição dd do Cu(II) indicando que o processo de inclusão não envolve o centro metálico.

## Conclusões

Os resultados aqui apresentados sugerem a ocorrência de um processo de inclusão de **1** na HPCD o qual deve se dar via interações de curta distância entre os anéis imidazólicos do ligante e a cavidade da ciclodextrina.

## Agradecimentos

Capes, CNPq, FAPERJ, IMBEBB

<sup>1</sup> Scarpellini, M.. *et al. Inorg. Chem.* **2003**, 43, 8353..