

Interação de ciclodextrinas com a merocianina de Brooker em solução aquosa

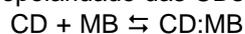
Jaqueline Nicolini (PG), Cristina de Garcia Venturini (PG), Jürgen Andreus (PQ), Clodoaldo Machado (PQ), Vanderlei Gageiro Machado* (PQ) gageiro@furb.br

Departamento de Química, Universidade Regional de Blumenau, FURB, CP 1507, Blumenau, SC, 89010-971

Palavras Chave: merocianina de Brooker, ciclodextrinas, complexo de inclusão, polaridade, corante solvatocrômico

Introdução

As ciclodextrinas (CDs) são oligossacarídeos cíclicos formados por unidades glicosídicas semelhantes a um cone truncado, com ambiente interno lipofílico e ambiente externo hidrofílico.¹ As investigações da polaridade do meio geralmente são realizadas a partir de sondas solvatocrômicas, como a merocianina de Brooker (MB), que pela mudança da polaridade do meio altera sua coloração, e conseqüentemente a posição da banda na região do visível.² Este trabalho tem por objetivo investigar, usando-se a técnica de UV-Vis, o comportamento da MB em solução aquosa contendo *a*-, *b*- e *g*-CD, (CDs naturais) e metil-*b*- (Me-*b*-) e hidroxipropil-*b*-CD (HP-*b*-CD) (CDs modificadas). A associação da MB com a CD apresentando cavidade adequada deve resultar em alterações na coloração da solução (Figura 1). Estas mudanças espectrais devem fornecer informações importantes acerca da formação dos complexos do tipo CD:MB e também da micropolaridade das CDs.



(MB livre) (MB inclusa)

Figura 1. Interação de MB:CD para formação de complexo de inclusão.

Resultados e Discussão

Todos os estudos foram realizados em solução aquosa tamponada em pH 10,55. As concentrações utilizadas foram de $1,0 \times 10^{-5}$ mol.dm⁻³ para a MB, $1,14 \times 10^{-2}$ mol.dm⁻³ para a *a*-CD, $7,05 \times 10^{-3}$ mol.dm⁻³ para a *b*-CD, $4,00 \times 10^{-2}$ mol.dm⁻³ para a *g*-CD, $3,00 \times 10^{-2}$ mol.dm⁻³ para a Me-*b*-CD e $2,00 \times 10^{-2}$ mol.dm⁻³ para a HP-*b*-CD. As soluções das CDs foram feitas a partir da solução da MB para evitar efeito de diluição.

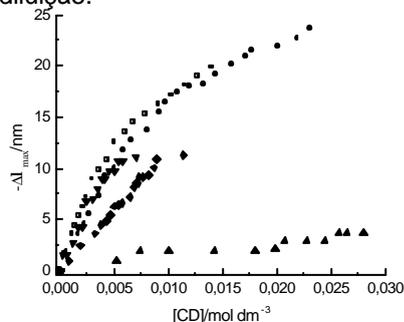


Figura 2. Variações do I_{\max} da banda solvatocrômica da MB em solução aquosa contendo adições crescentes de *a*-CD (♦), *b*-CD (▼), *g*-CD (▲), Me-*b*-CD (●), e HP-*b*-CD (■).

Foi colocada em uma cubeta de quartzo uma solução contendo MB, que em seguida foi titulada pela adição de pequenas quantidades de uma solução contendo a CD. A Figura 2 apresenta variações do I_{\max} da MB na presença de cada CD. Deslocamentos batocrômicos foram registrados na presença das CDs, significando que ocorreu transferência da MB de um meio polar, para um meio de menor polaridade (a cavidade da CD). Os deslocamentos batocrômicos máximos observados foram de 11,2 nm para a *a*-CD, 11,0 nm *b*-CD e 3,6 nm para a *g*-CD. A associação envolvendo as CDs modificadas apresentou os maiores deslocamentos batocrômicos (20,0 e 24,3 nm para a HP-*b*-CD e Me-*b*-CD, respectivamente), e conseqüente maior diferença na coloração da solução (amarela→alaranjada), devido à presença dos grupos Me- e HP- ligados à CD, o que aumenta a solubilidade e diminui a flexibilidade da CD. Os dados das absorvâncias em 444 nm para cada adição da CD permitiram o cálculo das constantes de associação CD:MB,³ exceto para *g*-CD (Tabela 1).

Tabela 1. Constantes de associação para os complexos CD:MB a 25 °C em solução aquosa.^a

CD	Ponto isosbético	K_{11}^b (dm ³ mol ⁻¹)	χ^2
<i>a</i> -CD	458,1	133,6±6,8	1,29×10 ⁻⁷
<i>b</i> -CD	455,0	424,2±32,8	2,27×10 ⁻⁷
Me- <i>b</i> -CD	457,1	108,2±2,9	1,08×10 ⁻⁶
Me- <i>b</i> -CD	456,2	68,4±3,3	9,97×10 ⁻⁶
HP- <i>b</i> -CD	457,0	205,8±7,4	1,65×10 ⁻⁶

^a pH 10,55 e $I=0,216$ mol.dm⁻³. ^b Calculado conforme descrito na ref. 3. ^c pH 10,0, meio não tamponado.

Conclusões

Foi verificado que nas CDs naturais *a*- e *b*-CD ocorre associação do tipo 1:1 (1MB:1CD) enquanto que a *g*-CD não forma complexo de associação com a MB por ocorrer um ajuste imperfeito entre a CD e a MB, o que pode ser justificado pelo grande diâmetro interno da *g*-CD. Verificou-se também que o aumento da força iônica do meio resulta no aumento da polaridade, levando assim ao aumento no valor das constantes de associação obtidas.

Agradecimentos

CAPES, FURB e CNPq.

¹ Connors, K.A. *Chem. Rev.* **1997**, 97, 1325.

² Reichardt, C. *Chem.Rev.* **1994**, 94, 2319.

³ Connors, K.A. Wiley-Interscience, New York, **1987**, cap. 4.