

Análise estrutural da β -ciclodextrina em fase gás: Uma comparação entre métodos clássicos e quânticos

Mateus F. Venâncio (IC)*, Clebio S. Nascimento Jr. (PQ), Wagner B. de Almeida (PQ)

*mateusfvenancio@gmail.com

Laboratório de Química Computacional e Modelagem Molecular (LQC-MM), Departamento de Química, ICEx Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), Belo Horizonte, MG 31.270-901, Brasil

Palavras Chave: Ciclodextrinas, Mecânica Molecular,

Introdução

Ciclodextrinas (CDs) são oligossacarídeos cíclicos formados por resíduos de D-glicose, os quais se apresentam sob a conformação de cadeira e são unidos através de ligações glicosídicas. Do ponto de vista estrutural, as CDs possuem a forma de um “cone truncado” no qual a parte mais larga é formada pelas hidroxilas primárias e a parte mais estreita pelas hidroxilas secundárias.

Dentre as diferentes áreas de estudo em ciclodextrinas, a Química Computacional vêm contribuindo de forma relevante na busca do entendimento estrutural e dinâmico dessa classe de moléculas. Entretanto, como consequência do tamanho desses sistemas, em muitos casos, o uso de métodos *ab initio* puros torna-se proibitivo devido a grande demanda computacional. Nesse sentido, uma alternativa interessante é se usar métodos clássicos (MM) ou híbridos (QM/MM), com o objetivo de se diminuir o custo computacional, porém sem a perda na qualidade dos resultados.

Nesse contexto, foi realizada uma análise estrutural da β -CD com o objetivo de se avaliar principalmente a qualidade das geometrias obtidas através da Mecânica Molecular (MM) nos diferentes campos de força (CFs) implementados no programa computacional Macromodel. Então, as diferentes estruturas da β -CD otimizadas através de MM foram comparadas quantitativamente e qualitativamente através de várias medidas de ângulos diedros com sua respectiva estrutura cristalográfica bem como sua estrutura otimizada no nível *ab initio* BLYP/6-31G(d,p).

Resultados e Discussão

Inicialmente, tendo como ponto de partida a estrutura da β -CD no nível BLYP/6-31G(d,p), realizou-se cálculos de otimização de geometria através de mecânica molecular nos CFs: MM2*, MM3*, AMBER*, OPLS, MMFF, OPLS-2001 e OPLS-2005, implementados no Macromodel. Após a otimização, foram feitas várias medidas de ângulos diedros¹ os quais descrevem a estrutura molecular da β -CD, como mostrado na Figura 1.

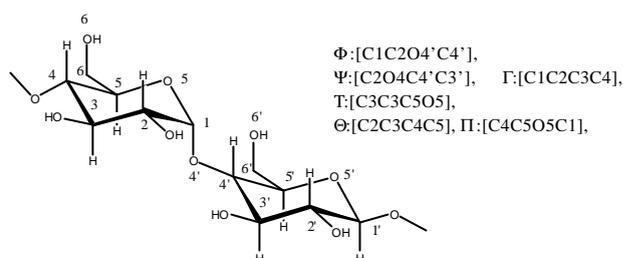


Figura 1- Representação esquemática de duas unidades de glicose da ciclodextrina com a numeração de seus átomos e com seus respectivos ângulos diedros.

Na tabela 1, são mostrados os valores médios para cada um dos ângulos acima relacionados, calculados através da média aritmética dos valores encontrados para cada uma das unidades glicosídicas que formam a β -CD, assim como o desvio padrão para cada um dos ângulos estudados.

Tabela 1- Valores médios (em graus) dos ângulos diedros medidos para as diferentes estruturas da β -CD? e seus respectivos desvios

	β -CD							Ab initio	raio-X
	MM2*	MM3*	AMBER*	OPLS	MMFF	OPLS-2001	OPLS-2005		
F	246±17	247±15	134±11	263±16	251±17	278±75	205±19	236±1	231±6
?	111±23	113±20	124±11	101±17	110±22	110±21	116±22	127±2	128±9
G	305±0,7	303,9±0,8	301,4±0,2	296±1	304,8±0,2	303,2±2	300±1	301±1	306±3
?	306±1	304,6±0,6	304,8±0,4	305,6±0,6	308±1	308±1	309,7±0,8	306,9±0,3	304±4
T	54±1	53,5±0,8	57,0±0,4	59±1	51±1	53±1	53,4±0,8	56,1±0,2	55±3
?	58,1±0,3	62,4±0,3	56,3±0,2	51,7±0,7	59,5±0,5	59,2±0,6	56,1±0,6	55,5±0,2	60±4
MGTA	39,2	35,2	25,2	36,9	38,1	41,9	43,7	5,4	19,4

Conclusões

De acordo com os resultados obtidos, é possível observar que para o campo de força AMBER*, a estrutura da β -CD sofre a menor variação quando comparada com a estrutura cristalográfica e a estrutura *ab initio*. Sendo assim, pode-se concluir que o AMBER* deve ser o campo de força mais adequado para estudos posteriores envolvendo sistemas que contenham sistemas supramoleculares a base de CDs.

Agradecimentos

CNPq e FAPEMIG.

¹ Nascimento Jr., C. S. et al. *Química Nova*, 27, n. 6, p. 882-888, **2004**.