

# ANÁLISE DOS MECANISMOS DE CRISTALIZAÇÃO DE COMPLEXOS DE INCLUSÃO DE METIL- $\beta$ -CICLODEXTRINA

**Alberto Cesário Pereira<sup>1\*</sup> (PG), Cristiane Pilissão<sup>1</sup> (PQ), Tainára Orlando<sup>1</sup> (PQ). \*albertocesario1@gmail.com**

Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR), Curitiba, PR, Brasil. tainaraorland@gmail.com

Palavras Chave: *Interações intermoleculares. Mecanismos de cristalização. Complexos de inclusão. Ciclodextrina.*

## Introdução

As ciclodextrinas (CDs) são macrociclos capazes de alojar moléculas em suas cavidades formando complexos de inclusão<sup>1</sup>. A síntese dessas estruturas, que são do tipo receptor-substrato, é relevante uma vez que as propriedades do substrato são modificadas quando complexado, em termos da estabilidade, solubilidade, entre outros<sup>2</sup>. Neste contexto, o estudo visa compreender os mecanismos de cristalização e as principais interações que ocorrem nos complexos de inclusão de CDs, visto que o controle desse processo permite a obtenção de estruturas e propriedades específicas. Para isso, quatro complexos de inclusão formados com metil- $\beta$ -ciclodextrina (receptor) foram avaliados em relação às interações intermoleculares, variando os substratos,<sup>3</sup> como mostra a Figura 1.

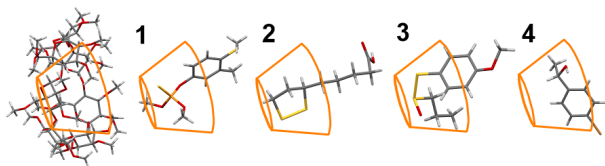


**Figura 1.** Representação esquemática dos complexos 1-4, além da metil- $\beta$ -ciclodextrina (O autor, 2024).

## Resultados e discussão

Com cálculos de DFT, análise QTAIM,  $G_{AI}$  e a determinação das áreas de contato entre os dímeros dos *clusters* supramoleculares, foi possível observar a simetria nas estruturas dos *clusters*, bem como detectar os caminhos de interação nos complexos de inclusão e as contribuições energéticas estabilizadoras das interações<sup>3</sup>. De modo geral, as interações mais estabilizadoras entre receptor-substrato foram as ligações de hidrogênio do tipo  $CH\cdots X$  ( $X=O, S, Br$ ), mas também foram observadas contribuições relevantes de interações do tipo  $H\cdots H$ . A partir da normalização dos dados de energia (NG) e área (NC) dos dímeros, foi possível constatar um perfil

semelhante para os complexos **1**, **2** e **3**, em que há três núcleos principais que fazem parte do mecanismo de cristalização, como mostra a Figura 2.

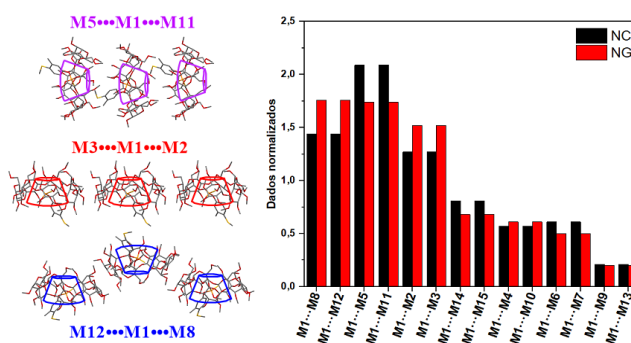


**Figura 2.** Núcleos da cristalização dos complexos **1-3** e dados de NG e NC para **1** como exemplo (O autor, 2024).

Para o complexo **4** não foi observado esse perfil, mostrando que apesar de nos principais núcleos de todas as estruturas, as ciclodextrinas terem maior influência na cristalização, os substratos também interferem no empacotamento cristalino.

## Conclusões

As principais interações que estabilizam o complexo são ligações de hidrogênio entre os componentes, além disso, observou-se que os mecanismos de cristalização das estruturas dependem prioritariamente da metil- $\beta$ -ciclodextrina, mas os substratos também influenciam.

## Agradecimentos

CAPES, PPGQ-UTFPR, NUQUIMHE-UFSM,  
LSinCOL-UTFPR, DAQBi-UTFPR.

## Referências e notas

- (1) Venturini, C. et. al. *Química Nova*. **2008**. 31, 2.
- (2) Cid-Samamed, A. et. al. *Food Chemistry*. **2022**. 384, 132467.
- (3) Orlando, T. et. al. *European Journal of Organic Chemistry* **2019**. 2019, 21.