



## ESTUDO TEÓRICO DOS EFEITOS DE CONFINAMENTO NO ESPECTRO DE DICROÍSMO CIRCULAR ELETRÔNICO DA CÂNFORA

Ismael De Alencar Pessoa<sup>1</sup>; Iran Da Luz Sousa<sup>2</sup>; Angelica Alves Leandro<sup>3</sup>; Igor Jose Gomes Da Silva<sup>4</sup>;

Orientando(a) - Campus Ouricuri do IFSertãoPE - E-mail: Ismaelalencar001@gmail.com<sup>1</sup>; Orientador(a) - Campus Ouricuri do IFSertãoPE - E-mail: iran.sousa@ifsertao-pe.edu.br<sup>2</sup>; Co-autores(as)s - Campus Ouricuri do IFSertãoPE - E-mails: angelica.leandro@aluno.ifsertao-pe.edu.br<sup>3</sup>; igor.jose@ifsertao-pe.edu.br<sup>4</sup>;

### RESUMO

A espectroscopia de Dicroísmo Circular Eletrônico (ECD) é um método utilizado principalmente para resolução de problemas relacionados com a estereoquímica de moléculas quirais. Recentemente, a cânfora tem sido empregada como molécula modelo para cálculos ECD. A literatura recente tem reportado a preparação experimental de complexos de inclusão da Cânfora em  $\beta$ -Ciclodextrinas ( $\beta$ -CD). Todavia, estudos acerca do efeito de Ciclodextrinas no espectro de ECD da cânfora não têm sido descritos. Dessa forma, este estudo objetiva investigar teoricamente os efeitos do confinamento na estrutura eletrônica da cânfora encapsulada na  $\beta$ -CD, focando nas alterações do espectro de ECD. Sendo assim, foi realizada uma varredura energética via método semi empírico PM6 de forma a obter as energias de complexação entre a cânfora e a  $\beta$ -CD. Assim, a estrutura com maior energia de complexação foi otimizada com o método ONIOM, utilizando BP86/6-31+G(d,p) para o nível alto e B97D/STO-3G para o nível baixo. O ECD da cânfora isolada foi calculado com TD-BP86/6-31+G(d,p) e cânfora@ $\beta$ -ciclodextrina com TD-DFT, implementados no ONIOM novamente. Os resultados obtidos demonstram, via cálculos teóricos, que a formação do complexo de inclusão é energeticamente favorável. Ao analisar ambos os espectros é possível observar que as forças rotacionais são similares. Do ponto de vista espectral, observou-se um deslocamento batocrômico em torno de 12 nm após a inclusão da cânfora na cavidade da  $\beta$ -CD. Infere-se, portanto, que a modificação espectral do ECD intrínseco da cânfora está relacionada tanto com modificações conformacionais devido a adaptação ao processo de inclusão como as interações dos momentos de dipolos de transição eletrônica da cânfora com as unidades  $\alpha$ -D-glicopiranosose da  $\beta$ -CD. Essas interações do ponto de vista químico, podem estar relacionadas com as interações intermoleculares entre a cânfora e a  $\beta$ -CD.

**Palavras-chave:** Cânfora;  $\beta$ -Ciclodextrina; ECD.

**Modalidade:** PIBIC

**Campus:** Ouricuri

**Agradecimentos:** Ao CENAPAD-UFC pela infraestrutura computacional e ao CNPq pelo apoio financeiro.