

## SINTESE E CARACTERIZAÇÃO DO COMPLEXO DE INCLUSÃO FORMADO ENTRE BIS-GMA E $\beta$ -CICLODEXTRINA

Rafael Minski Savanhago<sup>1</sup>, Marcia Margarete Meier,<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Acadêmico(a) do Curso de Licenciatura em Química - CCT- PROBIC/UDESC

<sup>2</sup> Orientador, Departamento de Química – marcia.meier@udesc.br.

Palavras-chave: *Ciclodextrina, Bis-GMA, dental, inclusão, metacrilato, polímero*

Apesar do crescente uso de compósitos dentais de matriz metacrílica, suas propriedades ainda são objeto de estudo visando mimetizar à estrutura dental natural das propriedades físicas, químicas e estéticas. O presente trabalho tem como objetivo sintetizar e caracterizar complexos de inclusão entre  $\beta$ -ciclodextrina ( $\beta$ -CD) e um monômero frequentemente utilizado em materiais odontológicos, 2,2-bis[4-(2-hidroxi-3-metacriloxipropoxi)fenil]-propano (Bis-GMA), com o intuito de aumentar a estabilidade química deste monômero. Os complexos de inclusão foram caracterizados por ressonância magnética nuclear (RMN) e de espectroscopia no infravermelho (FTIR), bem como ensaios de resistência a flexão (RF) e de absorção de água em matrizes poliméricas na presença e ausência de  $\beta$ -CD.

A  $\beta$ -ciclodextrina é constituída por 7 unidades de glicose ligadas entre si por ligações  $\alpha$ -1,4. A cavidade da  $\beta$ -CD possui um diâmetro de 6,0 a 6,5 angstrons e uma altura de 7,9 angstrons. Tal cavidade tem a capacidade de receber moléculas hospedes como no caso o Bis-GMA.

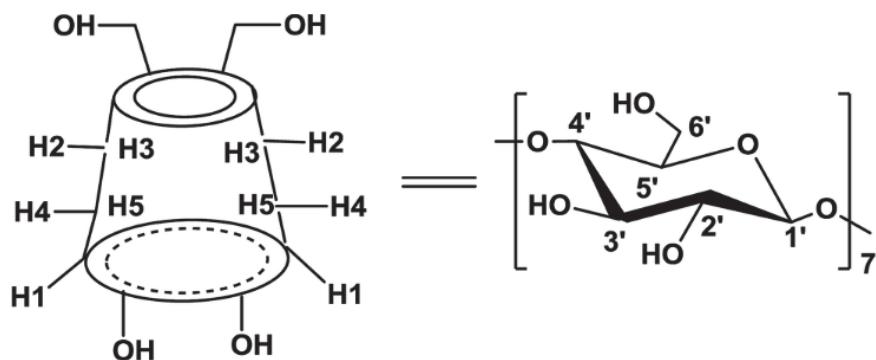


Figura 1: Representação a  $\beta$ -ciclodextrina destacando a organização dos hidrogênios.

O Bis-GMA é um monômero metacrílico produzido através da reação entre o bisfenol A e metacrilato de glicidila. Sofre polimerização quando exposto a luz ultravioleta ou misturado a um catalisador. É utilizado como material de implante de ligação e como componentes de resina de selantes dentais e materiais restauradores compostos.

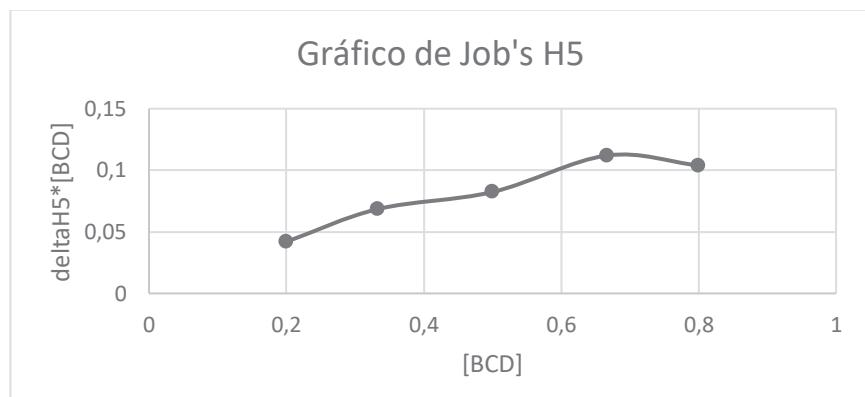
Inicialmente complexos de inclusão com diferentes teores de BisGMA e  $\beta$ -CD foram sintetizados em meio aquoso. Os espectros de FTIR da BCD pura e de mais dois complexos de inclusão nas proporções  $\beta$ -CD/Bis-GMA 1:1(mol/mol) e 2:1(mol/mol), indicam, respectivamente, um deslocamento do  $\nu$ C=O (1714,8; 1719,0; 1723,0  $\text{cm}^{-1}$ ), e do  $\nu$ OH (3430,0; 2197,0; 3282,2  $\text{cm}^{-1}$

<sup>1)</sup>). Tais resultados sugerem a existência de forças intermoleculares de ponto de hidrogênio entre  $\beta$ -CD e Bis-GMA.

Paralelamente matrizes poliméricas foram preparadas por fotopolimerização (468nm) contendo 0% (controle) e 1,3 % m/m de  $\beta$ -CD e submetidas aos testes de RF e de absorção de água, nos quais não se constatou uma diferença estatística significativa, evidenciando que a presença da  $\beta$ -CD não aumenta a solubilidade do complexo nem reduz a resistência a flexão do mesmo. Este resultado indica que a presença de  $\beta$ -CD não causou alteração do perfil de absorção de água, apesar de sua característica hidrofílica. Dessa forma, não trouxe prejuízo à matriz polimérica.

Com o objetivo de elucidar a interação entre o monômero e a  $\beta$ -ciclodextrina amostras do complexo  $\beta$ -CD/Bis-GMA 1:1(mol/mol) foram dissolvidas em D<sub>2</sub>O e analisadas por RMN. Determinou-se o deslocamento químicos dos hidrogênios H3 e H5 (Figura 1) internos à cavidade de  $\beta$ -CD. Constando-se um deslocamento químico ( $\Delta$ ppm) de 0,0798ppm e 0,1647ppm dos sinais de H3 e H5, respectivamente. Estes valores sugerem o encapsulamento de Bis-GMA no interior da cavidade da  $\beta$ -ciclodextrina.

Na sequência, aplicou-se o método de Job's (método de variação continua) para determinar a proporção estequiométrica entre a molécula hospede e a hospedeira. Para isso, complexos de inclusão nas proporções 4:1, 2:1, 1:2 e 1:4 (mol/mol) foram analisados por RMN<sup>1</sup>H e analisou-se novamente  $\Delta$ ppm de H3 e H5, gerando o gráfico da Figura 2. Há indícios da formação de complexos de estequiometria  $\beta$ -CD/Bis-GMA 2:1(mol/mol).



**Figura 2 – Aplicação do Job's plot em relação a H5.**

Um dos objetivos ao utilizar o método de Job's plot era determinar a constante de associação (K) através da equação de Scott's (  $[\text{Bis-GMA}] / \Delta\delta \text{ obs} = [\text{Bis-GMA}] / \Delta\delta \text{ max} + \Delta\delta \text{ max} / K_a$  ), porém o método não se mostra eficaz para complexos com estequiometria diferente de 1:1 (mol/mol). Então, no momento pesquisa-se alternativas para a determinação de K.

MEIER, M.M., Estudo dos complexos de inclusão entre beta e gama-ciclodextrina com os ácidos graxos cáprico e caprílico. Dissertação de Mestrado UFSC, Florianópolis. 2000.

PARK, J., ESLICK, J., Q., MISRA, A., SPERNICER, P. The Influence of chemical structure on the properties in methacrylate-based dentin adhesives. *Dental Materials*, 27 (11), pp. 1086-1093, 2011.

UPADHYAY, S.K., KUMAR, G. NMR and molecular modelling studies on the interaction of fluconazole with  $\beta$ -cyclodextrina. *Ghemistry Central Journal*, 2009.