

SINTESE E CARACTERIZAÇÃO DO COMPLEXO DE INCLUSÃO FORMADO ENTRE BIS-GMA E β -CICLODEXTRINA

Rafael Minski Savanhago¹, Marcia Margarete Meier,²

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

² 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 β -ciclodextrina (β -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 β -CD.

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

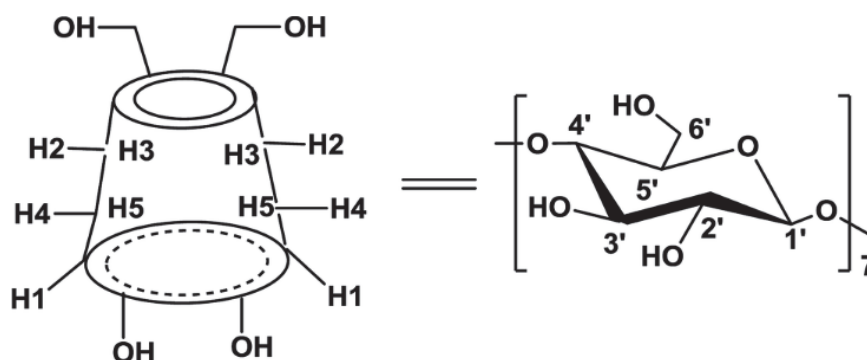


Figura 1: Representação a β -ciclodextrina destacando a organização dos hidrogênios.

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

¹). Tais resultados sugerem a existência de forças intermoleculares de ponto de hidrogênio entre β -CD e Bis-GMA.

Paralelamente matrizes poliméricas foram preparadas por fotopolimerização (468nm) contendo 0% (controle) e 1,3 % m/m de β -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 β -CD não aumenta a solubilidade do complexo nem reduz a resistência a flexão do mesmo. Este resultado indica que a presença de β -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 β -ciclodextrina amostras do complexo β -CD/Bis-GMA 1:1(mol/mol) foram dissolvidas em D₂O e analisadas por RMN. Determinou-se o deslocamento químicos dos hidrogênios H3 e H5 (Figura 1) internos à cavidade de β -CD. Constando-se um deslocamento químico (Δ 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 β -ciclodextrina.

Na sequência, aplicou-se o método de Job's (método de variação contínua) 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 RMN¹H e analisou-se novamente Δ ppm de H3 e H5, gerando o gráfico da Figura 2. Há indícios da formação de complexos de estequiometria β -CD/Bis-GMA 2:1(mol/mol).

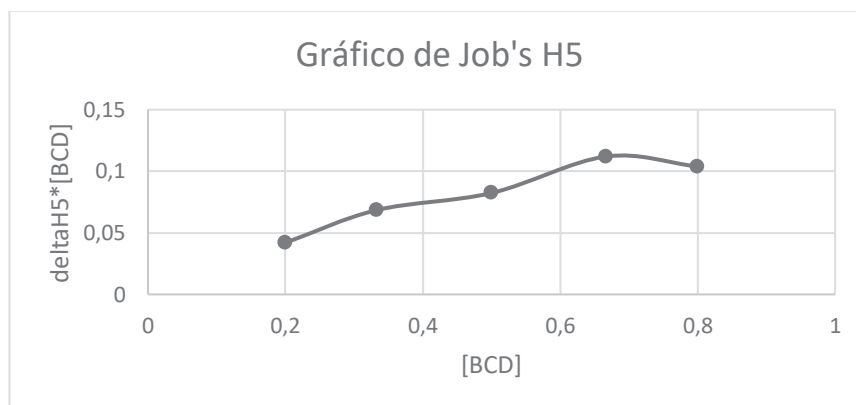


Figura 2 – Aplicação do Job's plot em relação a H5.

Um dos objetivos ao utilizar o método de Job's plot era determinar a constante de associação (K) através da equação de Scott's ($[Bis-GMA] / \Delta\delta_{obs} = [Bis-GMA] / \Delta\delta_{max} + \Delta\delta_{max} / K_a$), 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., SPERNER, 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 β -ciclodextrina. Chemistry Central Journal, 2009.