

# Estudo do processo de complexação do Calixareno Diethylsulfoxy p-tert-butyl cálix[4]arene (CLS) com íons de mercúrio.

Afonso Henrique Garcia, Ingrid Bernardes Santana Martins, Alexandre Suman de Araujo

Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” - UNESP, campus de São José do Rio preto.

Curso: Química Ambiental, [garcia.afonso1@gmail.com](mailto:garcia.afonso1@gmail.com), bolsista PIBIC.

Palavras Chave: Calixarenos, Simulações por dinâmica molecular, Físico-química inorgânica

## Introdução

Devido aos impactos ambientais decorrentes do desenvolvimento econômico e social, surge a necessidade de se utilizar novas formas de controle de contaminação<sup>1</sup>. O presente estudo teve o intuito de realizar simulações computacionais através do método de dinâmica molecular (DM) para estudar o comportamento do calixareno Diethylsulfoxy p-tert-butyl calix[4]arene (CLS) em solução de acetonitrila e íons de metal pesado<sup>2</sup>.

## Objetivo

Objetivou-se observar computacionalmente a complexação do íon  $Hg^{2+}$  pelo calixareno com o intuito de entender melhor a físico-química desse processo. Esse entendimento pode contribuir para o desenvolvimento de novos calixarenos mais potentes e específicos.

## Material e Métodos

Foram realizadas simulações com um sistema contendo uma caixa com moléculas de acetonitrila como solvente, um calixareno Diethylsulfoxy p-tert-butyl calix[4]arene (CLS) e íons de mercúrio cuja concentração variou de 1 a 3 íons por caixa, usando o pacote de programas NAMD e o campo de forças CGenFF, compatível com o CHARMM.

## Resultados e Discussão

Através das simulações, foi possível verificar em que frame de simulação o íon metálico de mercúrio se aproximou da cavidade hidrofílica da molécula de calixareno, sendo que, em uma distancia menor do que 10 ångströms (Å) considera-se que houve interação eletrostática (o íon metálico se complexou, mesmo que momentaneamente). Foi possível através de gráficos gerados por programa de plotagem de gráficos (xmgrace) a verificação da ocorrência de complexação em determinados momentos da simulação. As conformações do sistema em alguns dos momentos de complexação observados, que correspondem aos menores valores de distancia cavidade hidrofílica - íon, são mostradas na figura a seguir.

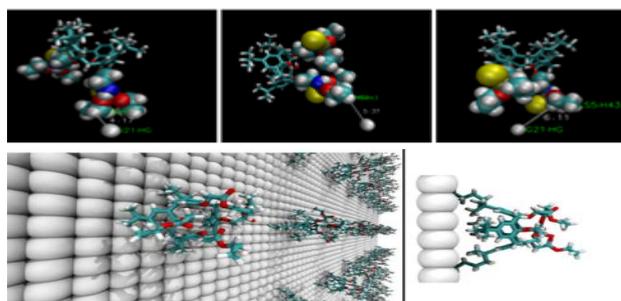


Figura 1. Calixarenos complexando íons de metais e pesados e suas possíveis aplicações como filtro.

Tabela 1. Momentos de complexação

1 íon com um calixareno					
1 Vale		2 Vale		3 Vale	
Frame	Distância (Å)	Frame	Distância (Å)	Frame	Distância (Å)
1786	5,03	7880	4,60	4499	4,26
3 íons com um calixareno (1º íon)					
1 Vale		2 Vale		3 Vale	
Frame	Distância (Å)	Frame	Distância (Å)	Frame	Distância (Å)
8208	4,17	22442	5,37	32211	6,11
3 íons com um calixareno (2º íon)					
Frame	Distância (Å)	Frame	Distância (Å)	Frame	Distância (Å)
4676	9,88	20000	4,44	32348	5,64
3 íons com um calixareno (3º íon)					
Frame	Distância (Å)	Frame	Distância (Å)	Frame	Distância (Å)
6022	5,67	19932	6,47	32190	6,85

## Conclusões

Conclui-se pouca diferença entre a complexação dos calixarenos que foram simulados com 1 e com 3 íons, demonstrando que, no método de simulação utilizado neste trabalho, a concentração não influi na complexação. Além disso, foi possível observar o modo de ligação dos íons com o calixareno, o que em trabalhos futuros pode indicar as regiões fundamentais para a complexação do íon.

## Agradecimentos

Esta pesquisa tornou-se possível graças aos recursos computacionais disponibilizados pelo Núcleo de Computação Científica (NCC/GridUNESP) da Universidade Estadual Paulista (UNESP)

<sup>1</sup> de Araujo, Alexandre Suman. *Estudo do processo de complexação de calixarenos com íons metálicos e espécies neutras por simulações de Dinâmica Molecular*. tese de doutorado, São Carlos, 2006.

<sup>2</sup> A.F. Danil de Namor, W. Aparicio-Aragon, N. Nwogu, A. El Gamouz, O.E. Piro, E.E. Castellano, J. Phys. Chem. B 115 (2011) 6922–6934.