

**Universidad de Oriente**

**Facultad de Ciencias Naturales y Exactas**

**Departamento de Química**

VII Simposio Internacional de Química 2019 SIQ 2019

VII Conferencia "Ciencias Químicas"

Título:

Estudio del efecto de las ciclodextrinas sobre la solubilidad de imidazoles tetrasustituidos. Modelación molecular

**Autores**

* Lic. Yonatan Mederos Nuñez
* Dra.C. América García López
* MSc. Julio Rojas Vargas

**Resumen**

En el presente trabajo de investigación se estudió la mejoría de la solubilidad en sistemas acuosos para imidazoles arilsustituidos a partir de los resultados obtenidos por modelación molecular de los complejos de inclusión de estos con hidroxipropil-ciclodextrina (HCD) y sulfobutil-ciclodextrina (SCD). Este estudio se realizó en dos etapas: la primera, un acoplamiento molecular entre once imidazoles con dichas ciclodextrinas y la segunda una optimización de geometría empleando el método híbrido ONIOM MM/QM usando nivel de teoría PM3 para la capa baja (ciclodextrina) y DFT/6-31G para la capa alta (imidazol).

Con los resultados de la modelación se comprobó la mayor solubilidad aparente de los imidazoles en SCD. No obstante el cálculo de las energías de enlace entre las ciclodextrinas y los imidazoles demuestra que ambas ciclodextrinas solubilizan los imidazoles mediante formación de complejos de inclusión 1:1.