



Universidad de Concepción
Escuela de Graduados
Programa de Graduados en Química



**“Estudio computacional sobre la formación de
complejos de inclusión con huéspedes
alifáticos y aromáticos en α - y β -ciclodextrinas”**

Tesis para optar al grado de
Doctor en Ciencias con Mención en Química

Verónica Andrea Jiménez Curihual

Concepción, Diciembre de 2006

Resumen

En el presente trabajo de tesis se ha estudiado la formación de complejos de inclusión con moléculas alifáticas y aromáticas, en α -ciclodextrina (ACD) y β -ciclodextrina (BCD), haciendo uso de datos experimentales, técnicas estadísticas y cálculos computacionales semiempíricos (PM3) y *ab initio* (HF/STO-3G, HF/3-21G(d) y HF/6-31G(d)).

A partir del estudio realizado se ha concluido que la formación de complejos de inclusión depende de una combinación de interacciones de van der Waals, electrostáticas, hidrofóbicas y de transferencia de carga. Al respecto, se ha determinado que la inclusión de moléculas aniónicas favorece los procesos de transferencia electrónica entre el huésped y la ciclodextrina. Adicionalmente, se ha establecido que los impedimentos estéricos juegan un rol preponderante en la estabilización de los complejos formados por ACD.

Por otra parte, la obtención de geometrías optimizadas de ACD, BCD y 71 complejos de inclusión ha permitido comprobar que los métodos HF/STO-3G y HF/6-31G(d) proporcionan estructuras coherentes con la geometría experimental de las ciclodextrinas y sus complejos de inclusión.

Junto con los resultados obtenidos, este trabajo de tesis aporta innovaciones metodológicas para el estudio computacional y la caracterización estructural de las ciclodextrinas y sus complejos de inclusión. La importancia de estas nuevas herramientas se debe a que su utilidad trasciende el ámbito de estudio de las ciclodextrinas.