

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه بیرجند

پایان نامه کارشناسی ارشد شیمی آلی

عنوان

سنتز پیریدین های پرستخلاف از طریق واکنش های سه جزئی

استاد راهنما

دکتر سارا سبحانی

نگارش

سمانه خدادادی

شهریور ۱۳۹۱

کلیه مزایا از چاپ و تکثیر، نسخه برداری، ترجمه، اقتباس و..... از پایان نامه کارشناسی ارشد

برای دانشگاه سیرجند محفوظ می باشد. نقل مطالب با ذکر منبع بلا مانع است.

تقدیم به

پدرم به استواری کوه

مادرم به زلالی چشمه

آنانکه خورشید شدند و از روشنایی شان جان گرفتیم و

اکنون حاصل دستان خسته شان رمز موفقیتیم شد.

و

تقدیم به همسر

که وجودش شادی بخش، صفایش مایه آرامش و سایه مهربانی اش

سایه سار زندگی من است.

شکر و سپاس خدا را که بزرگترین امید و یاور در لحظه لحظه زندگیست.

سپاس گذار معلمی، مسم که اندیشیدن راه من آموخت، نه اندیشه‌ها را...

از سرکار خانم دکتر سارا سجانی که در این مدت صبورانه و دلسوزانه پیکیر و مشوق من بودند و راهنمایی‌ها و حمایت‌های ایشان

همواره کارگشای اینجانب بوده، کمال سپاس گذاری و تشکر را دارم. همچنین از جناب آقای دکتر عباسعلی اسماعیلی و سرکار

خانم دکتر قدیه باقرزاده که در بازنگری و تدوین این پایان نامه قبول زحمت کردند نهایت تشکر را دارم.

از تمامی اساتید، کارشناسان و مسئولین محترم گروه شیمی دانشگاه بیرجند که در طول انجام این پروژه مرایاری نمودند صمیمانه تشکر و

قدردانی می‌نمایم.

در نهایت از دوستان و هم‌آزمایگشاهای‌های خوبم خانم‌ها: بذرافشان، جهان‌شاهی، هنرمند، پاکدین، ناصری، رضوی،

آریانزاد، جعفری، عرب‌پور، موسوی، دوراندیشان، شیرینی، مرادی، سلطانی، مصباح، قاسم‌زاده، ظریفی و آقایان:

عرب‌شاهی، عاشوری، پریراد، حسینی، صفایی و مقبولی کمال تشکر را دارم.

## چکیده:

در این تحقیق سنتز پیریدین‌های پرستخلاف از طریق واکنش سه‌جزئی آلدهید، مالونونیتریل و تیول با استفاده از  $\beta$ -سیکلودکستریل در محیط آبی انجام شد. از مزایای این روش می‌توان به تک مرحله‌ای بودن واکنش، راندمان نسبتاً بالای محصولات و خالص سازی آسان آن‌ها و نیز عدم حضور محصولات جانبی اشاره کرد.

صفحه	عنوان
	فصل اول: مقدمه
۲	۱-۱- بخش اول: شیمی سبز
۲	۱-۱-۱- مقدمه
۳	۱-۱-۲- حلال‌های سبز
۴	۱-۱-۲-۱- آب
۵	۱-۱-۲-۲- حلال‌های فوق بحرانی
۵	۱-۱-۲-۳- مایعات یونی
۶	۱-۱-۲-۴- حلال‌های فلوئوره
۷	۲-۱- بخش دوم: سیکلودکسترین‌ها
۱۲	۱-۲-۱- سنتز سیکلودکسترین‌ها
۱۳	۲-۲-۱- کمپلکس‌های درون حلقه‌ای
۱۵	۱-۲-۲-۱- عوامل مؤثر در ایجاد کمپلکس‌های درون حلقه‌ای
۱۶	۲-۲-۲-۱- روش‌های کمپلکس شدن
۱۷	۱-۲-۲-۲-۱- کمپلکس شدن هم رسوبی
۱۷	۲-۲-۲-۲-۱- کمپلکس شدن سوسپانسیونی
۱۸	۳-۲-۲-۲-۱- کمپلکس شدن خمیری
۱۸	۴-۲-۲-۲-۱- کمپلکس شدن مخلوط مرطوب شده
۱۹	۵-۲-۲-۲-۱- کمپلکس شدن مخلوط خشک
۱۹	۳-۲-۱- کاربرد سیکلودکسترین‌ها
۲۰	۱-۳-۲-۱- کاربرد سیکلودکسترین‌ها در صنعت داروسازی
۲۰	۲-۳-۲-۱- کاربرد سیکلودکسترین‌ها در صنایع شیمیایی
۲۱	۳-۳-۲-۱- کاربرد سیکلودکسترین‌ها در صنعت کشاورزی
۲۱	۴-۳-۲-۱- کاربرد سیکلودکسترین‌ها در صنایع غذایی
۲۲	۵-۳-۲-۱- کاربرد $\beta$ -سیکلودکسترین‌ها در واکنش‌های آلی بعنوان کاتالیزور
۲۴	۳-۱- بخش سوم: سنتز ترکیبات هتروسیکل از طریق واکنش‌های چند جزئی
۲۴	۱-۳-۱- واکنش‌های چند جزئی

۲۵	۱-۳-۲- پیریدین
۲۶	۱-۳-۲-۱- سنتز پیریدین هانش
۲۶	۱-۳-۲-۲- نوآرایی سیامیشن- دنستد
۲۷	۱-۳-۲-۳- سنتز گاترمن- اسکیتا
۲۷	۱-۳-۲-۴- سنتز پیریدین با استفاده از انامین ها و آلکینون ها
۲۸	۱-۳-۲-۵- سنتز پیریدین با استفاده از واکنش سه جزئی آلدهید، مالونونیتریل و تیوفنول
۲۹	۱-۴- اهداف
	فصل دوم: بخش تجربی
۳۱	۲-۱- دستگاه‌ها و مواد شیمیایی
۳۱	۲-۲- روش عمومی سنتز مشتقات ۲-آمینو-۳-و۵-دی کربونیل-۶-تیو پیریدین
۳۲	۲-۳- سنتز ۲-آمینو-۴-فنیل-۶-(فنیل تیو) پیریدین -۳-و۵-دی کربونیتریل
۳۲	۲-۴- اطلاعات طیفی
	فصل سوم: بحث و نتیجه‌گیری
۳۶	۳-۱- مقدمه
۳۶	۳-۲- بهینه کردن شرایط واکنش
۳۸	۳-۳- سنتز مشتقات پیریدین در حضور $\beta$ -CD در شرایط بهینه شده
۴۰	۳-۴- تفسیر طیف
۴۰	۳-۵- واکنش سه جزئی آلدهید، مالونونیتریل و تیول در حضور کاتالیزورهای مختلف
۴۲	۳-۶- اثر آلدهیدهای حجیم و پراستخلاف
۴۳	۳-۷- نتیجه‌گیری
۴۴	ضمیمه
۵۵	مراجع



## فهرست شکل‌ها:

صفحه	عنوان
۹	شکل ۱-۱: ساختار شیمیایی سیکلودکسترین‌های $\alpha$ ، $\beta$ و $\gamma$
۹	شکل ۲-۱: ساختار مخروطی شکل $\gamma$ -سیکلودکسترین
۱۲	شکل ۳-۱: نمودار حلالیت (میلی گرم سیکلودکسترین / گرم آب) سیکلودکسترین در آب بعنوان تابعی از دما
۱۴	شکل ۴-۱: از کمپلکس‌های میزبان-مهمان سیکلودکسترین‌ها
۴۵	شکل ۳-۱: طیف IR ترکیب 1
۴۶	شکل ۳-۲: طیف $^1\text{HNMR}$ ترکیب 1
۴۷	شکل ۳-۳: طیف $^1\text{HNMR}$ باز شده ترکیب 1
۴۸	شکل ۳-۴: طیف FT-IR ترکیب 14
۴۹	شکل ۳-۵: طیف $^1\text{HNMR}$ ترکیب 14
۵۰	شکل ۳-۶: طیف $^1\text{HNMR}$ باز شده ترکیب 14
۵۱	شکل ۳-۷: طیف $^1\text{HNMR}$ باز شده ترکیب 14
۵۲	شکل ۳-۸: طیف $^{13}\text{CNMR}$ ترکیب 14
۵۳	شکل ۳-۹: طیف $^{13}\text{CNMR}$ باز شده ترکیب 14
۵۴	شکل ۳-۱۰: طیف $^{13}\text{CNMR}$ باز شده ترکیب 14

## فهرست جدول‌ها:

صفحه	عنوان
۴	جدول ۱-۱: واکنش دیلز آلدِر بین ترانس-۴و۲-هگزا دی انیل استات و N-پروپیل مالیمید در حضور حلال‌های مختلف
۱۰	جدول ۲-۱: خصوصیات اصلی سیکلودکسترین‌های $\alpha$ ، $\beta$ و $\gamma$
۳۷	جدول ۱-۳: بهینه کردن شرایط واکنش
۳۸	جدول ۲-۳: واکنش سه جزئی آلدئید، مالونونیتریل و تیول در حضور $\beta$ -CD
۴۱	جدول ۳-۳: واکنش سه جزئی آلدئید، مالونونیتریل و تیول در حضور کاتالیزورهای مختلف
۴۲	جدول ۴-۳: واکنش سه جزئی مالونونیتریل، تیول و آلدئیدهای حجیم و پراستخلاف

## Abbreviations

Bmim	1-butyl-3-methylimidazolium
Bpy	N-butylpyridinium
BTF	Benzotrifluoride
CD	Cyclodextrin
CGTase	Cyclodextrin Glycosyltransferase
DABCO	1,4-diazabicyclo[2.2.2]octane
DBU	1,8-Diazabicyclo[5.4.0]undec-7-ene
DMSO	Dimethyl sulfoxide
IBX	<i>o</i> -iodoxybenzoic acid
MCRs	Multicomponent Reactions
NMR	Nuclear Magnetic Resonance
SCFs	Supper critical fluids
TBAF	Tetra- <i>n</i> -butyl ammonium fluoride
TBAH	Tetrabutylammonium hydroxide
TLC	Thin Layer Chromatography

# فصل اول

## مقدمه

## ۱-۱- بخش اول: شیمی سبز

### ۱-۱-۱- مقدمه

با وجود اینکه علم شیمی نقش اساسی در پیشرفت جامعه‌ی بشری بر عهده داشته است، اما طی روند پیشرفت خود، علاوه بر مزایای بسیار، آسیب‌های چشم‌گیری به سلامت انسان و محیط زیست وارد کرده است [۱]. از این‌رو نگرشی علمی در ارتباط با مسائل زیست محیطی، به تدریج جایگزین روش‌های قدیمی‌تر شد. از این نگرش نوین با عنوان شیمی سبز<sup>۱</sup> یاد می‌شود که می‌توان آن را بعنوان طراحی فرآیندهای شیمیایی و تولید محصولاتی بیان کرد که باعث حذف یا کاهش استفاده از مواد مضر و اجتناب از ایجاد هر گونه آلودگی در سطح مولکولی می‌شود.

شیمی سبز ابزاری مهم و اساسی در جلوگیری از آلودگی و راهی سازگار با محیط زیست پایدار می‌باشد و بر دوازده اصل بنیادی زیر استوار است [۲]:

- ۱- پیشگیری از تولید فرآورده‌های زاید
- ۲- افزایش بهره‌وری از اتم، صرفه‌جویی اتمی
- ۳- طراحی مواد و فرآورده‌های شیمیایی سالم‌تر
- ۴- طراحی فرآیندهای شیمیایی با آسیب کمتر
- ۵- بهره‌گیری از حلال‌ها و شرایط واکنش سالم‌تر
- ۶- افزایش بازده انرژی
- ۷- بهره‌گیری از مواد اولیه‌ی تجدید پذیر
- ۸- پرهیز از ایجاد مشتق‌های شیمیایی مانند تغییرات شیمیایی و فیزیکی گذرا و مواد حد واسط
- ۹- بهره‌گیری از کاتالیزورها
- ۱۰- طراحی تجزیه پذیر بودن فرآورده‌ها

---

<sup>۱</sup>Green Chemistry

۱۱- تحلیل زمان واکنش برای پیشگیری از آلودگی

۱۲- کاهش احتمال رویدادهای ناگوار

براساس قواعد اصلی شیمی سبز، شیمی‌دان‌ها باید تا جایی که امکان دارد، شیوه ای را طراحی کنند و موادی را بکار ببرند که اثرات سوء کمتری برای انسان و محیط زیست داشته باشند. اغلب برای یک واکنش شیمیایی، مواد اولیه‌ی گوناگونی وجود دارد که از میان آن‌ها می‌توان مناسب‌ترین را برگزید. فرآورده‌های شیمیایی باید به گونه ای طراحی شوند که با وجود کاهش خطر سمیت کار خود را به خوبی انجام دهند.

از دهه‌های گذشته، ورود حلال‌های سمی به طبیعت سلامت انسان و محیط زیست را به چالش کشیده است. در واقع حلال‌ها باعث ایجاد آلاینده‌های مضر می‌شوند. مشکلات ناشی از جداسازی حلال‌ها از محصولات، بازیافت کامل این حلال‌ها و مخاطرات زیست محیطی از جمله عواملی هستند که توجه محققان را به سمت استفاده از حلال‌های سبز معطوف کرده است [۳].

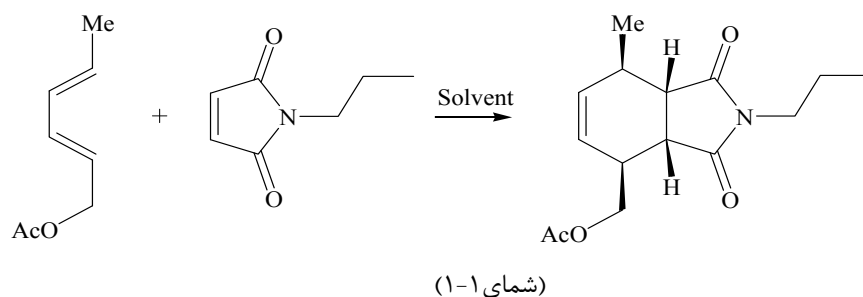
### ۱-۱-۲- حلال‌های سبز

امروزه تمایل برای استفاده و تولید حلال‌های آلی بسیار کاهش یافته است. یکی از شرایط انجام واکنش‌های آلی سنتز در شرایط بدون حلال است. انجام واکنش در شرایط بدون حلال مزایایی از قبیل آلودگی کم، هزینه‌ی پایین و روند بکارگیری ساده را در پی دارد. همچنین توسعه‌ی حلال‌های جایگزین غیر سمی بعنوان یکی از چندین هدف شیمی سبز از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است [۴]. مزیت‌های حلال‌های سبز در حال گسترش است و باعث بهینه کردن شرایط جدید و توسعه‌ی آن برای واکنش‌ها می‌گردد. درصد محصولات را افزایش داده و انرژی قابل استفاده را کاهش می‌دهد [۵]. در این قسمت به برخی از این حلال‌ها اشاره می‌شود.

## ۱-۱-۲-۱-۱ آب

انجام واکنش‌های آلی در محیط آب یا محلول‌های آبی از نقطه نظر شیمی سبز از اهمیت زیادی برخوردار است. اگرچه حلال‌های آلی متداول مانند کلروفرم، تولوئن و متانول بدلیل خواص عالی که دارند مورد استفاده قرار می‌گیرند اما برای بشر و حیوانات بسیار مضر و سرطان زا می‌باشند [۶]. استفاده از حلال آب دارای مزایایی از جمله قیمت پایین، در دسترس بودن، ایمن و غیر قابل اشتعال بودن و فاقد تأثیرات مضر مانند سرطان زایی می‌باشد [۷و۴]. در نتیجه انجام واکنش‌های آلی در آب هم از نقطه نظر سنتز و هم سازگاری با محیط زیست بسیار مطلوب است [۸].

بعنوان مثال، تأثیر آب بر واکنش دیلز آلدِر بین ترانس-۲و۴-هگزادینیل استات و N-پروپیل مالیمید بررسی شده است (شماي ۱-۱). همان‌طور که در جدول ۱-۱ مشاهده می‌شود، در حضور آب واکنش در کمترین زمان ممکن انجام شده است [۹].



جدول ۱-۱: واکنش دیلز آلدِر بین ترانس-۲و۴-هگزادینیل استات و N-پروپیل مالیمید در حضور حلال‌های مختلف

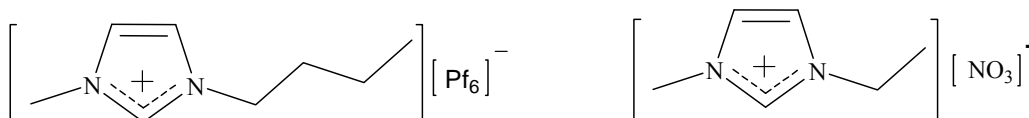
حلال	زمان (ساعت)	راندمان (%)
Toluene	۱۴۴	۷
CH <sub>3</sub> CN	۱۴۴	۴۳
CH <sub>3</sub> OH	۴۸	۸۲
Neat	۱۰	۸۲
H <sub>2</sub> O	۸	۸۱

## ۱-۲-۱-۱- حلال‌های فوق بحرانی

حلال‌های فوق بحرانی (SCFs)، مواد سیالی هستند که با تنظیم دما و فشار، در بالای نقطه‌ی بحرانی خود قرار گرفته‌اند و می‌توان با تغییر میزان دما و یا فشار، این حلال‌ها را بیشتر به فاز مایع و یا فاز گاز نزدیک کرد و دانسیته‌ی آن‌ها را تغییر داد. سیستم حلال‌هایی مانند کربن دی‌اکسید فوق بحرانی (SC) و مخلوط کربن دی‌اکسید فوق بحرانی/آب بطور منظم و دقیق در گستره‌ی وسیعی از واکنش‌ها مورد استفاده قرار می‌گیرد. کربن دی‌اکسید فوق بحرانی برای واکنش‌پذیری بیشتر مواد شیمیایی در واکنش‌ها و سنتزها بکار می‌رود و بدلیل نقشی که در استخراج مواد دارا می‌باشد و همچنین بدلیل سمیت بسیار پایین آن، از لحاظ اقتصادی و صنعتی دارای اهمیت بسزایی است [۱۰ و ۱۱].

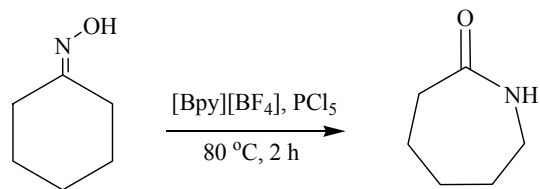
## ۱-۲-۱-۲- مایعات یونی

مایعات یونی از دو جزء کاتیونی و آنیونی تشکیل شده‌اند، نقطه ذوب پایین داشته و در دمای اتاق مایعند. این حلال‌ها مایعاتی ویسکوز بوده و ترکیبات آلی، معدنی و بعضی مواد پلیمری را در خود بخوبی حل می‌کنند [۱۲]. فشار بخار پایینی دارند و برخلاف حلال‌های آلی فرار نیستند. این دسته از مواد می‌توانند در واکنش‌های سنتزی نقش کاتالیزوری داشته باشند [۱۳]. چند نمونه از مایعات یونی (شمای ۲-۱) و واکنش‌های سنتزی که بوسیله‌ی مایعات یونی مختلف کاتالیز شده‌اند در زیر آورده شده است [۱۴-۱۶] (شمای ۳-۱ و ۴-۱).



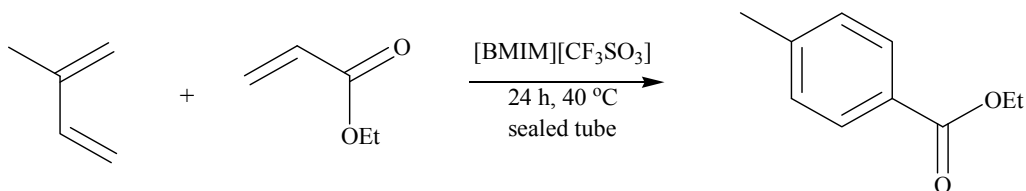
(شمای ۲-۱)





BPy = *N*-butylpyridinium 99%

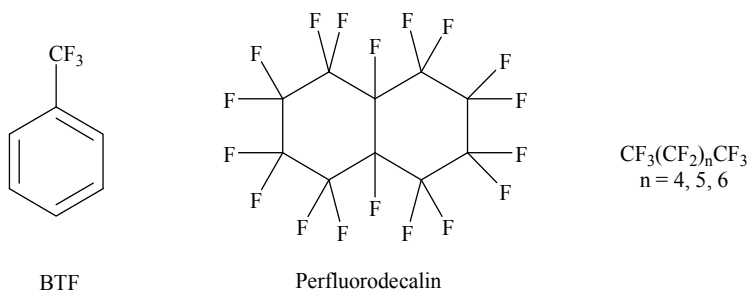
(شمای ۱-۳)



(شمای ۱-۴)

### ۱-۱-۲-۴ - حلال‌های فلوئوره

از ویژگی‌های این حلال‌ها می‌توان به غیر سمی بودن، فراریت کم و حلالیت پایین آن‌ها در آب اشاره کرد. این حلال‌ها اغلب بدلیل امتزاج وابسته به دما و تشکیل فاز دوم با حلال‌های آلی در دماهای مختلف، برای فرآیند استخراج مورد استفاده قرار می‌گیرند. حلال‌های فلوئوره و فاز آلی در دمای اتاق غیر قابل امتزاجند، ولی پس از گرم شدن هر دو فاز مخلوط شده و یک فاز هموزن بدست می‌آید که واکنش در آن رخ می‌دهد. چند نمونه از این حلال‌ها در زیر نشان داده شده است [۱۷] (شمای ۱-۵).



(شمای ۱-۵)

## ۱-۲- بخش دوم: سیکلودکسترین‌ها

کاتالیست‌ها به سه دسته‌ی عمده تقسیم بندی می‌شوند [۱۸]:

۱. کاتالیست‌های زیستی<sup>۱</sup>

۲. کاتالیست‌های فلزی<sup>۲</sup>

۳. کاتالیست‌های آلی<sup>۳</sup>

موضوع کاتالیست‌های آلی، یکی از مهمترین موضوعات در شیمی آلی است. سیکلودکسترین‌ها از دسته کاتالیست‌های آلی با مولکول‌های بزرگ<sup>۴</sup> می‌باشند که در غیاب فلزات فعالیت کاتالیزوری از خود نشان می‌دهند. همچنین آن‌ها با توجه به توانایی‌شان برای اتصال به مولکول‌ها در داخل یک حفره بعنوان مدل‌های آنزیمی در نظر گرفته می‌شوند [۱۹]. سیکلودکسترین‌ها که گاهی اوقات از آن‌ها با نام سیکلوآمیلاز یاد می‌شود، پلی‌ساکاریدهایی با وزن مولکولی کم و متعلق به طبقه‌ی عمومی الیگوساکاریدها<sup>۵</sup> هستند که از واحدهای ۵ یا بیشتر  $\alpha$ -D-گلوکز تشکیل شده و از طریق اتصالات  $\alpha$ -۴ به یکدیگر متصل شده‌اند و تشکیل یک حلقه یا دستبند را می‌دهند [۲۰-۲۳]. این حلقه‌ها گرچه به ظاهر شبیه اثرهای تاجی هستند ولی با آن‌ها تفاوت‌های کلی دارند. از جمله کوچک‌ترین آن‌ها یعنی  $\alpha$ -سیکلودکسترین دارای اندازه‌ای ۲ برابر اندازه ۱۸-کراون ۶ و حفره‌ی آن حدود ۲ برابر عریض‌تر است. سیکلودکسترین ابتدا در سال ۱۸۹۱ توسط ویلیرز<sup>۶</sup> با نام سلولوزین کشف شد [۲۴]. بعد از آن شاردینگر<sup>۷</sup> سه سیکلودکسترین طبیعی به نام  $\alpha$ ،  $\beta$  و  $\gamma$  را مشخص کرد. بنابراین این ترکیبات با عنوان قندهای شاردینگر معرفی شدند [۲۵]. در بین سال‌های ۱۹۱۱ تا ۱۹۳۵ به مدت ۲۵ سال

<sup>1</sup> Bio Catalysis

<sup>2</sup> Metal Catalysis

<sup>3</sup> Organo Catalysis

<sup>4</sup> Supra Molecular

<sup>5</sup> Oligosaccharide

<sup>6</sup> Villiers

<sup>7</sup> F. Schardinger

ارنست پرینگ‌شیم<sup>۱</sup> در آلمان مشخص نمود که سیکلودکسترین‌ها می‌توانند کمپلکس‌های آبی پایداری با بسیاری از ترکیبات شیمیایی ایجاد کنند.

سیکلودکسترین‌ها از نشاسته بوسیله‌ی تبدیلات آنزیمی بدست می‌آیند. بعد از کشف ابتدا بعنوان ترکیبات سمی در نظر گرفته شدند و از آن‌ها فقط برای تشکیل کمپلکس برای تحقیقات و بررسی‌های علمی استفاده می‌شد، ولی بعدها تحقیقات ثابت کرد که آن‌ها نه تنها سمی نیستند بلکه می‌توانند مفید هم باشند و کاربردهای وسیعی در صنایع غذایی، داروسازی، شیمیایی و کشاورزی دارند. همچنین برای نگهداری رنگ‌های طبیعی، ویتامین‌ها و عطرها استفاده می‌شوند [۲۶ و ۲۷].

سیکلودکسترین‌ها از واحدهای ۵ یا بیشتر  $\alpha$ -D- گلوکز تشکیل شده‌اند. ولی حلقه‌ی ۵ واحدی آن بطور طبیعی یافت نشده است. بزرگ‌ترین سیکلودکسترین شامل ۳۲ واحد  $\alpha$ -D- گلوکز می‌باشد ولی سیکلودکسترین‌های اصلی شامل ۶، ۷ و ۸ واحد  $\alpha$ -D- گلوکز بصورت زیر هستند [۲۸ و ۲۹] که بطور تجاری به فروش می‌رسند.

$\alpha$ - سیکلودکسترین: شامل ۶ واحد  $\alpha$ -D- گلوکز می‌باشد.

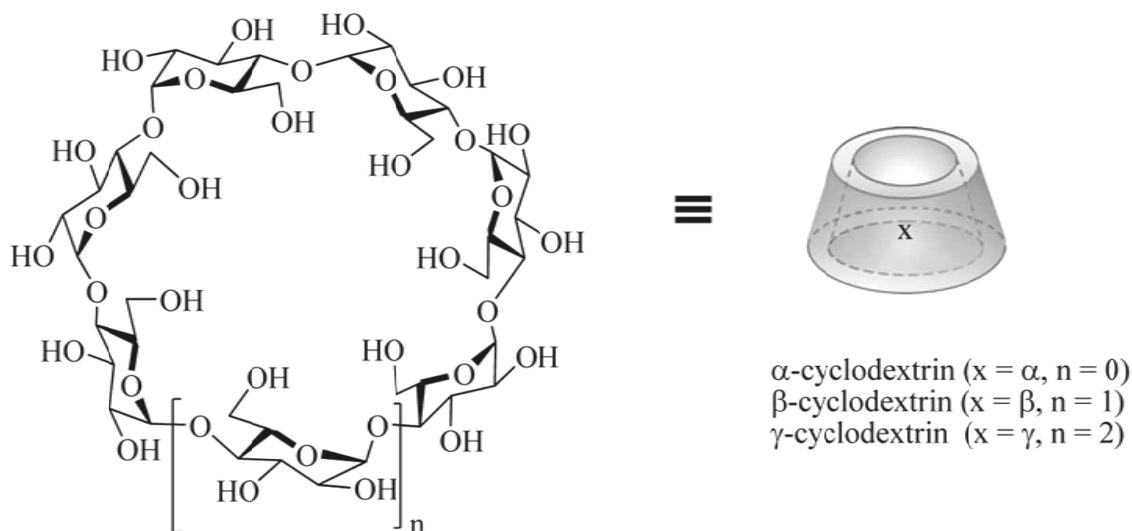
$\beta$ - سیکلودکسترین: شامل ۷ واحد  $\alpha$ -D- گلوکز می‌باشد.

$\gamma$ - سیکلودکسترین: شامل ۸ واحد  $\alpha$ -D- گلوکز می‌باشد.

شکل ۱-۱ ساختار شیمیایی سه سیکلودکسترین طبیعی  $\alpha$ ،  $\beta$  و  $\gamma$  را نشان می‌دهد. با توجه به شکل واحدهای  $\alpha$ -D- گلوکز از طریق اتصالات ۱،۴- $\alpha$  به یکدیگر متصل شده‌اند و تشکیل یک حلقه یا دستبند را می‌دهند.

---

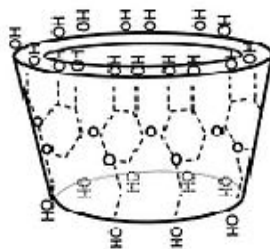
<sup>۱</sup> Ernst. Pringsheim



شکل ۱-۱: ساختار شیمیایی سیکلودکسترین‌های  $\alpha$ ،  $\beta$  و  $\gamma$

سیکلودکسترین‌ها به شکل مخروطی هستند، یعنی حفره‌ی آن‌ها از بالا به پایین کمی تنگ‌تر می‌شود و مولکول شکل یک سطل بی‌ته را به خود می‌گیرد (شکل ۱-۲).

اطراف سطل متشکل از ۶ حلقه‌ی ۶ ضلعی و یا بیشتر است که تقریباً هر یک در سطوح جانبی سطل قرار می‌گیرند. عمق سطل معادل عرض حلقه‌ی ۶ ضلعی است. در خارج و در اطراف دهانه‌ی بزرگ‌تر (بالایی) گروه‌های OH نوع دوم  $C_2$  و  $C_3$  قرار دارند. در حالیکه در اطراف دهانه‌ی کوچک‌تر (پایینی) گروه‌های OH نوع اول  $C_6$  و یا گروه‌های  $-CH_2 OH$  قرار می‌گیرند. جائیکه گروه‌های هیدروکسیل نوع دوم قرار گرفته‌اند قطر حفره نسبت به جائیکه گروه‌های هیدروکسیل نوع اول حضور دارند وسیع‌تر است.



شکل ۱-۲: ساختار مخروطی شکل  $\gamma$ -سیکلودکسترین