

V SEMANA UNIVERSITÁRIA DA URCA

XXIII Semana de Iniciação Científica

07 a 11 de Dezembro de 2020

Tema: "Os impactos e desafios da pandemia COVID no ensino, pesquisa e extensão"



CARACTERIZAÇÃO ESTRUTURAL E ESPECTROSCÓPICA DA MEMBRANA DE QUITOSANA CONTENDO O PRINCÍPIO ATIVO CARVACROL

Karla Susanna Tavares Grangeiro Belém¹, Alexandre Magno Rodrigues Teixeira², Dráulio S. da Silva³, Hélcio S. dos Santos⁴

Resumo: A quitosana é um biomaterial muito estudado devido sua variedade de aplicações na biomedicina, é usado na produção de pele artificial, regeneração de tecido e na construção de sistemas de liberação controlada de medicamentos. O carvacrol é um composto que possui várias qualidades, como suas características hidrofóbicas. O composto carvacrol tem grande aplicabilidade em vários ramos, desde a indústria alimentícia, até a indústria de cosméticos. Este trabalho teve como intuito estudar os resultados da aplicação do carvacrol em membranas de quitosana, realizando sua caracterização estrutural e espectroscópicas, buscando assim agregar valor a membrana de carvacrol. A caracterização foi feita por espectroscopia usando a técnica de Reflexão Total Atenuada no Infravermelho com Transformada de Fourier (ATR-FTIR). Para se obter as propriedades estruturais e vibracionais do carvacrol foi utilizado um método de cálculo baseado na Teoria do Funcional da Densidade (DFT). Todos os espectros obtidos foram comparados com espectros experimentais, e as vibrações foram analisadas de acordo com a Distribuição Potencial de Energia (PED). Os resultados obtidos mostraram que não houve diferença significativa nos espectros ATR-FTIR e FT-Raman das membranas de quitosana mais glicerol em comparação com os espectros das membranas associadas ao carvacrol. Estes resultados mostram que é necessário aumentar a porcentagem do princípio ativo carvacrol na membrana para que se obtenha modificações expressivas nas interações moleculares.

Palavras-chave: Carvacrol. Espectroscópica. Quitosana. Teoria do funcional da densidade.

1. Introdução

Os biomateriais são definidos como materiais produzidos através de produtos naturais ou de origem sintética que quando em contato com sistemas biológicos há interação. São comumente utilizados como uma alternativa eficaz para garantir a regeneração de tecidos vivos lesionados (GAHARWAR et al, 2020).

Entre os biomateriais utilizados para o tratamento de lesões, a quitosana vem sendo extensivamente investigada devido a sua variedade de aplicações na biomedicina, como a produção de peles artificiais, regeneração de tecidos e na construção de sistemas de liberação controlada de medicamentos. Este

1 Universidade Regional do Cariri, email: karla.belem@urca.br

2 Universidade Regional do Cariri, email: Alexandre.teixeira@urca.br

3 Universidade Estadual Vale do Acaraú, email: Draulio4000@yahoo.com.br

4 Universidade Estadual Vale do Acaraú, email: Helciodossantos@gmail.com

V SEMANA UNIVERSITÁRIA DA URCA

XXIII Semana de Iniciação Científica

07 a 11 de Dezembro de 2020

Tema: "Os impactos e desafios da pandemia COVID no ensino, pesquisa e extensão"



biomaterial é um polímero produzido a partir da quitina presente no exoesqueleto de artrópodes. A quitosana é biodegradável e biocompatível, também é solúvel em soluções aquosas contendo ácidos orgânicos ou inorgânicos diluídos (Campana e Signini, 2001; Butler e Pudney, 2003).

O Carvacrol é um composto monoterpreno fenólico, apresentando grupos de hidroxilas livres, possui características hidrofóbicas e é encontrado em plantas, tais como o tomilho (*Thymus vulgaris*) e o orégano (*Origanum vulgare*). É um componente utilizado em vários ramos, desde a indústria alimentícia, muito reconhecido pelo seu sabor e cheiro atraentes, até a indústria de cosméticos. Este composto apresenta propriedades antibacterianas promissoras, o que lhe permite um potencial farmacológico contra infecções bacterianas. Nos estudos de Juven et al. (1994) e de Sivropoulou et al. (1996) o carvacrol foi caracterizado como inibidor de diferentes patógenos.

Ao investigar as propriedades antirradicais de compostos aromáticos pertencentes a óleos essenciais antioxidantes através de cálculos DFT (Teoria do Funcional da Densidade). Boulebd (2019) aponta que os compostos investigados (eugenol, safrol, miristicina, carvacrol, cinamaldeído e isoeugenol) apresentam potente atividade antirradical. Esse autor também afirma que através dos cálculos DFT, é possível calcular características estruturais, tais como descritores moleculares, orbitais moleculares de fronteira e mapeamento do potencial eletrostático molecular.

2. Objetivo

Este estudo teve como objetivo realizar a caracterização espectroscópica e estrutural de membranas de quitosana contendo o princípio ativo carvacrol. Utilizando-se de simulações computacionais para auxiliar na análise estrutural e espectroscópica do carvacrol, determinando a natureza dos modos vibracionais da substância feitas com base na Distribuição Potencial de Energia (PED), e realizar a caracterização estrutural e espectroscópica por Técnica de Espectroscopia infravermelho (FT-IR) em membranas de quitosana com o princípio ativo carvacrol. Procurando assim agregar valor a molécula de carvacrol por meio de seu uso com a membrana de quitosana, que por sua vez, possui grande importância farmacológica.

3. Metodologia

A amostra de carvacrol foi caracterizada por espectroscopia utilizando a técnica Reflexão Total Atenuada no infravermelho com transformada de Fourier (ATR-FTIR). O espectro ATR-FTIR foi obtido em temperatura ambiente em uma região de 400-4000 cm^{-1} .

Foi utilizado o programa de estrutura eletrônica *Gaussian 09* com base 6-311G (d,p) para realizar os cálculos computacionais. Foi utilizado método de cálculo baseado na Teoria do Funcional da Densidade (DFT) para obter as



propriedades estruturais e vibracionais do carvacrol. Estes cálculos permitiram a obtenção de todos os parâmetros químicos, estruturais e espectroscópicos da molécula em estudo.

Os espectros teóricos foram comparados com os experimentais. Todas as frequências calculadas foram ajustadas com base no fator escala que foi obtido nos cálculos feitos no programa *OriginPro 8.5*. As vibrações moleculares foram analisadas de acordo com a Distribuição de Energia Potencial (PED), obtidas utilizando o programa VEDA.

Também foi feito um estudo separado da molécula de carvacrol, que ajudou a definir melhor os resultados da pesquisa. Foram realizados cálculos de DFT com o funcional B3LYP e o conjunto de base 6-311G (d,p), usando o modelo de solvatação com clorofórmio como solvente, estes cálculos também foram feitos utilizando o programa Gaussian 09. Os cálculos para definir os valores escalares foram realizados em duas regiões do espectro, 2000-4000 cm^{-1} e 20-2000 cm^{-1} , com o intuito de minimizar os erros. Os cálculos resultaram os fatores escala $f=0,9342$ e $f=0,9567$, e com erros de raiz quadrada média geral (rmsov) sendo 54 cm^{-1} e 49 cm^{-1} respectivamente para as regiões mencionadas.

4. Resultados

A figura 1 apresentar a estrutura molecular da quitosana e do carvacrol. A figura 2 mostra os espectros ATR-FTIR e FT-Raman contendo diferentes quantidades do princípio ativo carvacrol adicionados a quitosana. As porcentagens de carvacrol utilizadas nas análises foram: 5%, 10%, 15%, 30% e 40%.

Figura 1: Estrutura molecular da Quitosana e do Carvacrol.

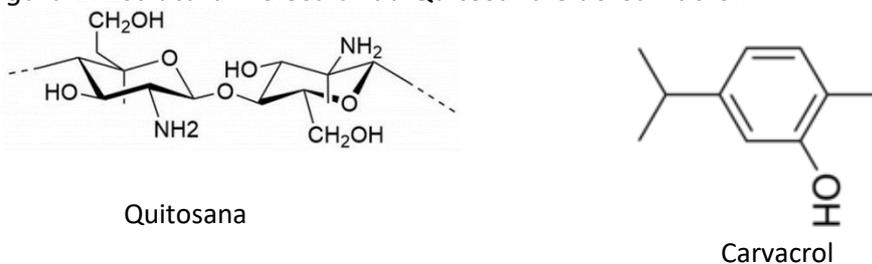
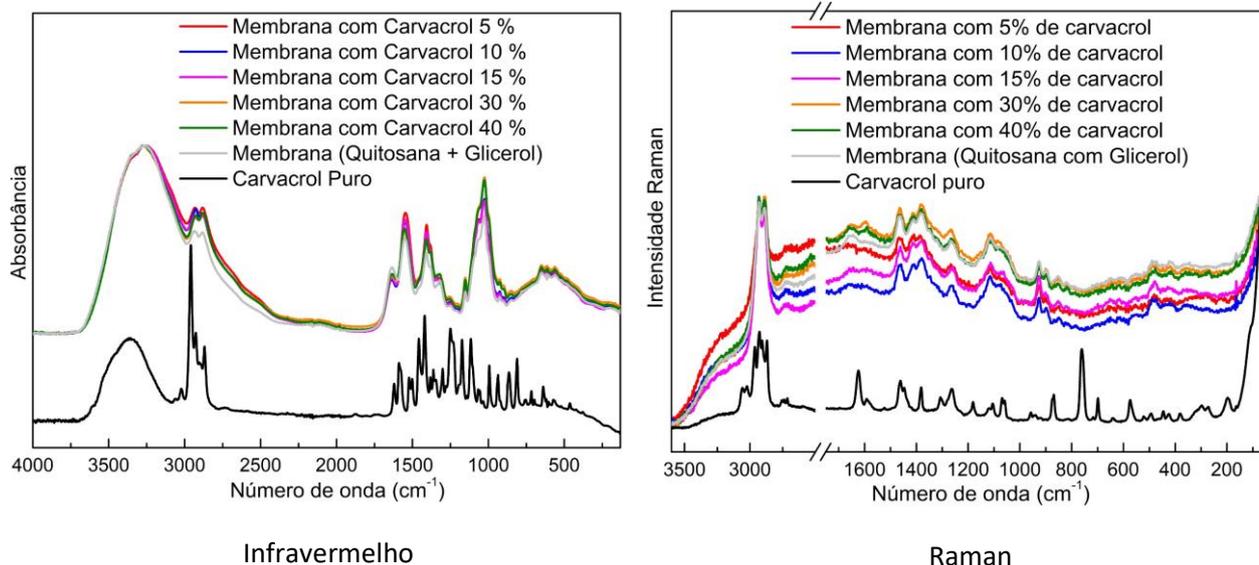


Figura 2: Bandas do infravermelho para a membrana de quitosana com diferentes porcentagens do princípio ativo carvacrol



V SEMANA UNIVERSITÁRIA DA URCA

XXIII Semana de Iniciação Científica

07 a 11 de Dezembro de 2020

Tema: "Os impactos e desafios da pandemia COVID no ensino, pesquisa e extensão"



Nossos resultados mostram que não há diferença significativa nos espectros ATR-FTIR e FT-Raman das membranas de quitosana mais glicerol em comparação com os espectros das membranas associada ao princípio ativo carvacrol.

A análise dos espectros ATR-FTIR e FT-Raman do princípio ativo carvacrol feita individualmente mostrou bons resultados quando comparados com os dados de outros estudos. As atribuições das bandas infravermelhas feitas para o carvacrol se mostra sobrepostas as bandas infravermelhas da membrana de quitosana e de glicerol.

5. Conclusão

Este projeto foi feito com o intuito de agregar valor ao carvacrol pela sua associação com a membrana de quitosana. A caracterização espectroscópica da membrana de quitosana com o princípio ativo carvacrol foi feita por meio da Técnica de Reflexão Total Atenuada no infravermelho (ATR-FTIR). Contudo, este estudo aponta a necessidade de aumentar os percentuais de carvacrol nas membranas com intuito de termos modificações mais significativas nas interações intermoleculares.

6. Agradecimentos

Agradeço ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), a Universidade Regional do Cariri (URCA) pela oportunidade de desenvolver esta pesquisa e ao Professor Dr. Alexandre Magno Rodrigues Teixeira pelo conhecimento passado a mim.

7. Referências

BUTLER, M. F.; PUDNEY, P. D. A. **Mechanism and kinetics of the crosslinking reaction between biopolymers containing primary amine groups and genipin** *Journal of polymer science part a-polymer chemistry*, v. 41, n. 24, p. 3941-3953, 2003.

CAMPANA, P. S. F.; SIGNINI, R. **Efeito de Aditivos na Desacetilação de Quitina**. *Polímeros*, v. 11, n. 4, p. 169-173, 2001.

GAHARWAR, Akhilesh K.; SINGH, Irtisha; KHADEMHOSEINI, Ali. Engineered biomaterials for in situ tissue regeneration. **Nature Reviews Materials**, p. 1-20, 2020.

V SEMANA UNIVERSITÁRIA DA URCA

XXIII Semana de Iniciação Científica

07 a 11 de Dezembro de 2020

Tema: "Os impactos e desafios da pandemia COVID no ensino,
pesquisa e extensão"



BOULEBD, Houssein. DFT study of the antiradical properties of some aromatic compounds derived from antioxidant essential oils: C–H bond vs. O–H bond. **Free Radical Research**, v. 53, n. 11-12, p. 1125-1134, 2019.

JUVEN, B. J., Kanner, J., Schved, F., & Weisslowicz, H. (1994). Factors that interact with the antibacterial action of thyme essential oil and its active constituents. **Journal of applied bacteriology**, v. 76(6), p. 626-631, 1994.