

# VI SEMANA UNIVERSITÁRIA DA URCA XXIV SEMANA DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA URCA

13 a 17 de Dezembro de 2021

Tema: "Centenário de Paulo Freire: contribuição da divulgação científica e tecnológica em defesa da vida, da cidadania e da educação"

## ESTUDO DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL DA CÂNFORA POR ATR-FTIR E CÁLCULOS DFT

Ana Joyce de Moraes Bento<sup>1</sup>, Igor Kleber C. Lima<sup>2</sup>, Alexandre Magno R. Teixeira<sup>3</sup>, Hécio S. dos Santos<sup>4</sup>

### Resumo

Cânfora (1,7,7-trimetilbicyclo[2.2.1]heptan-2-ona) é uma cetona terpenóide, obtida das árvores cânfora, e representa uma classe de compostos bioativos sintetizados por plantas. Sua forma química é C<sub>10</sub>H<sub>16</sub>O. Essa cetona natural de cadeia fechada com estrutura de aspecto invulgar é um monoterpene bicyclico cetônico que pode agir como precursor para compostos polifuncionais. Suas características organolépticas são odor forte e penetrante, sabor amargo e levemente fria ao tato, e suas propriedades biológicas são bastante variadas, possuindo ação antiinflamatória, antibacteriana, antimicrobiana e antifúngica. Também possui potencial de formação de novos compostos, através da formação de complexos com outros elementos. É possível usar espectroscopia de infravermelho para identificar certos grupos funcionais de um composto e suas bandas características, desvendando a estrutura do composto, o que permite identificar a estrutura por meio do exame do espectro e consulta de tabelas de infravermelho. Este trabalho visou investigar as propriedades estruturais e espectroscópicas da cânfora utilizando a técnica de Transformada de Fourier (ATR-FTIR) e cálculos de química quântica utilizando a Teoria do Funcional da Densidade. O espectro ATR-FTIR foi obtido em temperatura ambiente na região de 400-4000 cm<sup>-1</sup>. O programa Gaussian 09 foi usado para cálculos computacionais, usando os métodos de cálculos baseados em DFT para obter os modos normais da cânfora. O espectro teórico do espectro infravermelho foi comparado com o espectro experimental utilizando um fator de escala. Além disto, a análise das vibrações moleculares foi feita segundo o potencial de distribuição de energia (PED). A molécula de cânfora possui 27 átomos, então há 81 graus de liberdade. Excluindo os modos translacionais e rotacionais, restam 75 modos vibracionais para a cânfora. Modos de estiramento ( $\nu$ ) são os modos vibracionais mais comuns, pois ocorrem em 26 frequências vibracionais na região espectral de 107 cm<sup>-1</sup> até 947 cm<sup>-1</sup>, seguidos pelos modos

<sup>1</sup> Universidade Regional do Cariri, email: anajoyce.morais@urca.br

<sup>2</sup> Universidade Regional do Cariri, email: igor.lima@urca.br

<sup>3</sup> Universidade Regional do Cariri, email: alexandre.teixeira@urca.br

<sup>4</sup> Universidade Federal do Ceará, email: helcio.santos@ufc.br

# VI SEMANA UNIVERSITÁRIA DA URCA XXIV SEMANA DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA URCA

13 a 17 de Dezembro de 2021

*Tema: “Centenário de Paulo Freire: contribuição da divulgação científica e tecnológica em defesa da vida, da cidadania e da educação”*

de curvatura ( $\delta$ ) que possuem 25 ocorrências a região de  $960\text{ cm}^{-1}$  até  $1495\text{ cm}^{-1}$ . Modos de torção ( $\tau$ ) e modos de deformação no plano (Out) ( $\gamma$ ) também foram identificadas nas regiões de número de onda de  $1499\text{ cm}^{-1}$  até  $3108\text{ cm}^{-1}$ , e  $3116\text{ cm}^{-1}$  até  $3141\text{ cm}^{-1}$ , respectivamente. Esse estudo possibilitou conhecer o espectro infravermelho de absorbância da cânfora (experimental e teórico) e conhecer os modos vibracionais característicos dos grupos funcionais que estão presentes nesta substância natural.

**Palavras-chave:** Produtos naturais. Espectroscopia. Cânfora. Infravermelho.

**Agradecimentos:**

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq, ao Laboratório de Simulações e Espectroscopia Molecular - LASEMol.