

# 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"

## INVESTIGAÇÃO DAS PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E VIBRACIONAIS DE MEMBRANAS DE QUITOSANA CONTENDO O PRINCÍPIO ATIVO CARVACROL.

Karla Susanna Tavares Grangeiro Belém<sup>1</sup>, Alexandre Magno Rodrigues Teixeira<sup>2</sup>, Dráulio S. da Silva<sup>3</sup>, Hécio S. dos Santos<sup>4</sup>

**Resumo:** A quitosana é um biomaterial de uso biomédico, sendo muito utilizado no tratamento de lesões. O carvacrol é um composto que possui várias qualidades e vasta aplicação industrial. Este trabalho visou estudar os resultados da aplicação do carvacrol em membranas de quitosana, por meio da caracterização estrutural e espectroscópica, buscando valorizar a membrana contendo o composto carvacrol. A caracterização foi feita por espectroscopia usando a técnica de Reflexão Total Atenuada no Infravermelho com Transformada de Fourier (ATR-FTIR). Para obter as propriedades estruturais e vibracionais do carvacrol utilizou-se um método de cálculo baseado na Teoria do Funcional da Densidade (DFT). Comparou-se os espectros obtidos com espectros experimentais, e analisou-se as vibrações com base na Distribuição Potencial de Energia (PED). Os valores obtidos mostraram que não houve diferença significativa nos espectros ATR-FTIR e FT-Raman das membranas de quitosana mais glicerol comparado aos espectros das membranas associadas ao carvacrol. Os resultados apontam necessidade de aumento da porcentagem de carvacrol na membrana para obter modificações expressivas.

**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 apresentam interação quando em contato com sistemas biológicos. São comumente utilizados como uma alternativa eficaz para garantir a regeneração de tecidos vivos lesionados (GAHARWAR et al, 2020).

Um biomaterial amplamente utilizado é a quitosana, que tem tomado grande proporção devido a seus resultados em aplicações medicinais, como a produção de peles artificiais, regeneração de tecido e na construção de sistemas de liberação controlada de medicamentos. A quitosana possui baixo custo, tendo em vista que é um produto natural e renovável. Este biomaterial é um polímero

---

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

# 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”

produzido a partir da desacetilização da quitina. O mesmo está presente no exoesqueleto de artrópodes e na parede celular de fungos. 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). A quitosana, sendo um biopolímero do tipo polissacarídeo, possui uma estrutura molecular quimicamente similar à fibra vegetal chamada celulose, e diferencia-se somente nos grupos funcionais (Azevedo et al, 2007).

O Carvacrol é um composto monoterpeneo 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*), também sendo encontrado nos óleos essenciais. É um componente utilizado em vários ramos, desde a indústria alimentícia, sendo 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 contendo o princípio ativo carvacrol.

## 3. Metodologia

A amostra de carvacrol foi caracterizada através da espectroscopia utilizando-se a técnica Reflexão Total Atenuada no infravermelho com transformada de Fourier (ATR-FTIR). A obtenção do espectro ATR-FTIR foi feita em temperatura ambiente em uma região de 400-4000  $\text{cm}^{-1}$ .

# 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"

Foi utilizado o programa de estrutura eletrônica *Gaussian 09* com base 6-311G (d,p) para realização dos cálculos computacionais. Foi utilizado o método de cálculo baseado na Teoria do Funcional da Densidade (DFT) para obtenção das propriedades estruturais e vibracionais do carvacrol. Estes cálculos permitiram obter todos os parâmetros químicos, estruturais e espectroscópicos da molécula em estudo.

Os espectros teóricos foram comparados com os espectros experimentais. Todas as frequências calculadas foram ajustadas com base no fator escala que foi obtido nos cálculos feitos com auxílio do 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 feitos para definir os valores escalares foram realizados em duas regiões do espectro, 2000-4000  $\text{cm}^{-1}$  e 20-2000  $\text{cm}^{-1}$ , com a intenção 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  $\text{cm}^{-1}$  e 49  $\text{cm}^{-1}$  respectivamente para as regiões mencionadas.

## 4. Resultados

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

Figura 1: Estrutura molecular da Quitosana e do Carvacrol.

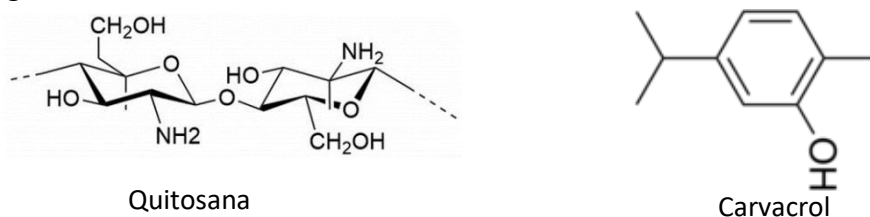
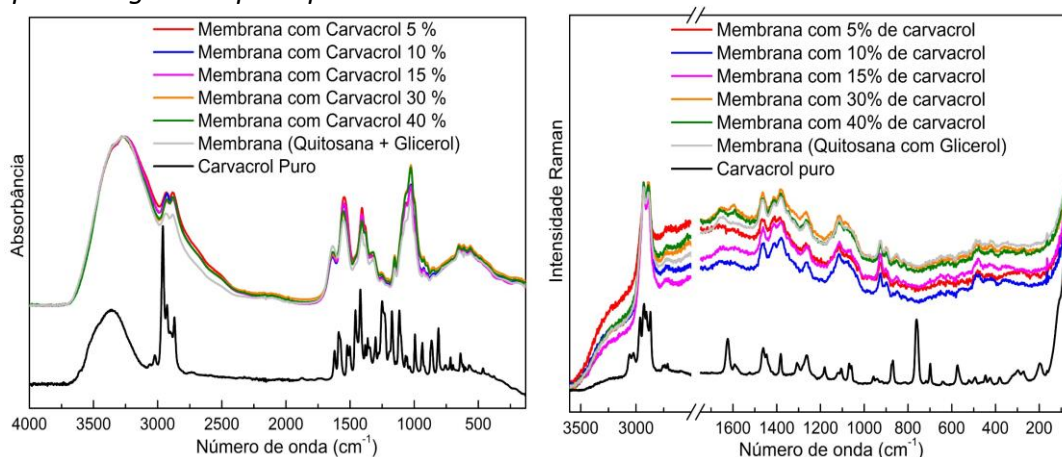


Figura 2: Bandas do infravermelho para a membrana de quitosana com diferentes porcentagens do princípio ativo carvacrol



# 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"*

Os resultados obtidos mostram 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 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 mostraram sobrepostas as bandas infravermelhas da membrana de quitosana e de glicerol.

## 5. Conclusão

Este estudo 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 mostra que há necessidade de aumentar os percentuais de carvacrol nas membranas com intuito de obter modificações que apresentem 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.

## 7. Referências

AZEVEDO, VVCea et al. Quitina e Quitosana: aplicações como biomateriais.

**Revista eletrônica de Materiais e processos**, v. 2, n. 3, p. 27-34, 2007.

BOULEBD, H. 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.

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.

**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"*

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

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

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.