

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"

EXPLORANDO AS FUNCIONALIDADES DE SOFTWARES COMPUTACIONAIS NO ESTUDO DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL DE ÓLEOS ESSENCIAIS DE FOLHAS E FRUTOS VERDES DE SCHINUS TEREBINTHIFOLIUS RADDI.

Filipe D. de Sousa¹, Alexandre Magno Rodrigues Teixeira², Dráulio S. da Silva³, Hércio S. dos Santos⁴, Carlos E. S. Nogueira⁵, Igor K. C. Lima⁶

Resumo: *Schinus terebenthifolius* Raddi, popularmente conhecida como aroeira da praia, é uma planta muito utilizada na medicina popular para o tratamento de doenças respiratórias, úlceras e infecções causadas por fungos e bactérias [1]. Estudos de espectroscopia vibracional de substâncias ativas extraídas das plantas para produção de medicamentos são essenciais para fornecer informações detalhadas sobre a sua estrutura molecular e suas propriedades vibracionais [2,3]. Tais estudos têm sido aplicados com sucesso para identificar os principais componentes de óleos essenciais e para distinguir diferentes espécies de várias plantas aromáticas. A técnica espectroscópica por reflexão total atenuada no infravermelho por transformada de Fourier (ATR-FTIR) e cromatografia gasosa acoplada à espectrofotometria de massa (CG-MS) demonstraram serem promissoras na identificação dos constituintes químicos presentes em óleos essenciais [2,3]. Neste trabalho, os espectros ATR-FTIR dos óleos essenciais de folhas e frutos verdes de *Schinus terebenthifolius* foram registrados em temperatura ambiente. Cálculos computacionais baseados na teoria funcional da densidade (DFT) foram realizados para obter o espectro de absorvância no infravermelho do constituinte químico majoritário dos óleos essenciais das folhas e frutos verdes de *Schinus terebenthifolius*. As folhas e os frutos verdes de *Schinus terebenthifolius* foram colhidos na cidade de Eusébio, estado do Ceará, nordeste do Brasil. Através de análise por cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massa foi possível identificar 99,7 % da substância química constituintes do óleo essencial das folhas, e 98,0 % do óleo essencial nos frutos verdes de *Schinus terebenthifolius*. O monoterpeneo D-limoneno foi apresentado como o principal componente volátil de folhas e nos frutos verdes. Os principais componentes do óleo essencial das folhas de *Schinus terebenthifolius* identificados foram: D-Limoneno (96,6%), α -Pineneno (1,1%), Mirceno (1,0%), β -cariofileno (0,5%) e δ -3-Careno (0,2%). Considerando que os principais componentes dos óleos

¹ Universidade Regional do Cariri, email:

² Universidade Regional do Cariri, email:

³ Universidade Estadual Vale do Acaraú, email:

⁴ Universidade Estadual Vale do Acaraú, email:

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"

essenciais dos frutos verdes de *Schinus terebinthifolius* identificados foram: D-Limoneno (39,5%), Terpinen-4-ol (31,1%), Sabinene (8,3%), óxido de cariofileno (3,6%), α -Terpineol (2,8%), β -cariofileno (2,3%), Germacreno D (0,7%), α -Muurolol (0,6%), β -Pineno (0,4%), α -Terpineol (0,4%), δ -Cadineno (0,2%) e Biciclogermacreno (0,1%). Os espectros ATR-FTIR experimentais dos óleos essenciais de *Schinus terebinthifolius* e os espectros de absorvância no infravermelho experimentais e o espectro calculado de seu constituinte químico majoritário foram devidamente comparados. Este procedimento permitiu a atribuição completa dos modos vibracionais para esses óleos essenciais.

Palavras-chave: Espectroscopia. Teoria funcional da densidade. óleo essencial.

1. Introdução

Schinus terebinthifolius Raddi conhecida popularmente como aroeira da praia, é uma planta amplamente utilizada na medicina popular para o tratamento de distúrbios respiratórios, úlceras e infecções causadas por fungos e bactérias [1]. Estudos de espectroscopia vibracionais de substâncias ativas extraídas de plantas medicinais são essenciais para fornecer informações detalhadas sobre suas propriedades estruturais e vibracionais [2,3]. Esses estudos foram aplicados com sucesso para identificar os principais componentes dos óleos essenciais e para distinguir diferentes espécies de várias plantas de especiarias [1].

2. Objetivo

O objetivo central deste projeto é investigar as propriedades estruturais e espectroscópicas e obtenção de parâmetros químicos de softwares de química molecular. O trabalho tem como objetivo realizar um estudo de espectroscopia vibracional dos óleos essenciais de folhas e frutos verdes de *Schinus terebinthifolius* Raddi. *Schinus terebinthifolius* é uma anarcadiaceae presente em regiões litorâneas brasileiras cuja importância terapêutica se deve à presença do seu óleo essencial. Suas propriedades vêm sendo estudadas a fim de encontrar novos compostos para o uso do controle alternativo de pragas e doenças. *Schinus terebinthifolius* é uma árvore da família anarcadiaceae, planta típica da vegetação litorânea brasileira, ocorre desde Pernambuco até o Rio Grande do Sul.

3. Metodologia

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"

Neste trabalho, aplicamos a técnica ATR-FTIR, bem como cálculos de teoria do funcional da densidade (DFT) para realizar um estudo de espectroscopia vibracional dos óleos essenciais de folhas e frutos verdes de *Schinus terebenthifolius*. As folhas e frutos verdes de *Schinus terebenthifolius* foram coletados na cidade de Eusébio, estado do Ceará, nordeste do Brasil. Por meio de análises por cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas foi possível identificar 99,7% dos constituintes químicos do óleo essencial das folhas, e 98,0% nos frutos verdes de *Schinus terebenthifolius*. Cálculos DFT com o funcional B3LYP e 6-31 G (d,p) conjunto de bases foram realizados usando o programa Gaussian 09 [4] nos principais componentes químicos nos óleos essenciais de *Schinus terebenthifolius*, a fim de elucidar algumas das faixas infravermelhas desses óleos essenciais. Em nossos cálculos, o fator de escala $f = 0,9613$ foi usado para ajustar as frequências vibracionais harmônicas teóricas dos principais componentes químicos com as bandas infravermelhas experimentais dos óleos essenciais [5].

Serão explorados os tutoriais dos softwares Gaussiam, GausView, ChemCraft e VEDA para obtenção de as propriedades estruturais e espectroscópicas e obtenção de parâmetros químicos em várias classes de compostos orgânicos.

4. Resultados

O monoterpeno D-limoneno apresentou-se como o principal componente volátil nas folhas e nos frutos verdes. Os principais componentes do óleo essencial das folhas de *Schinus terebenthifolius* Raddi identificados e suas respectivas porcentagens foram as seguintes: D-Limoneno (96,6%), α -Pineno (1,1%), Mirceno (1,0%), β -Cariofileno (0,5%) e δ -3-Careno (0,2%). Considerando que os principais componentes do óleo essencial dos frutos verdes de *Schinus terebenthifolius* identificados foram: D-Limoneno (39,5%), Terpinen-4-ol (31,1%), Sabineno (8,3%), Óxido de cariofileno (3,6%), α -Terpineol (2,8%), β -cariofileno (2,3%), Germacreno D (0,7%), α -Muurolol (0,6%), β -Pineno (0,4%), α -Terpineol (0,4%), δ -Cadineno (0,2%) e Bicyclogermacreno (0,1%). Estruturas moleculares dos principais componentes dos óleos essenciais das folhas e frutos verdes de *Schinus terebinthifolius* Raddi.

5. Conclusão

Os espectros ATR-FTIR de óleos essenciais de folhas e frutos verdes de *Schinus terebenthifolius* Raddi foram investigados em temperatura ambiente. Os espectros ATR-FTIR experimentais dos óleos essenciais de *Schinus*

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"

terebenthifolius Raddi e os espectros de absorvância no infravermelho calculados de seus constituintes químicos foram devidamente comparados. Este procedimento permitiu a atribuição completa dos modos vibracionais para esses óleos essenciais.

6. Referências

[1] H. Lorenzi, F.J. de Abreu Matos, Plantas Medicinai no Brasil: Nativas e Exóticas, Instituto Plantarum de Estudos da Flora, 2002.

[2] A.M.R. Teixeira et al. Vibrational spectroscopy study of essential oils from *Plectranthus amboinicus* Lour, Spreng and *Vanillosmopsis arborea* Baker, *Vibrational Spectroscopy* 98 (2018) 22–29.

[3] A.G.Q. Saraiva et al. Chemical analysis and vibrational spectroscopy study of essential oils from *Lippia sidoides* and of its major constituent, *Vibrational Spectroscopy* 110 (2020) 103111.

[4] M.J. Frisch, et al. Gaussian 09, Gaussian, Inc., Wallingford, CT, USA, (2009).

[5] M.W. Wong, Vibrational frequency prediction using density functional theory, *Chem. Phys. Lett.* 256 (1996) 391–