

Caracterização experimental do eugenol e do isoeugenol através de espectroscopias Raman e IR, suportadas pelo método DFT.

Gustavo Chevitarese Azevedo* (IC), Wesley T. Esteves (IC), Hélio Ferreira dos Santos (PQ), Luiz Fernando Cappa de Oliveira (PQ).
gustavoazevedo@ice.ufjf.br

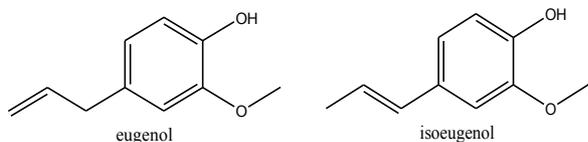
Núcleo de Espectroscopia e Estrutura Molecular - Departamento de Química, Universidade Federal de Juiz de Fora - UFJF, Juiz de Fora - MG – CEP: 36036-900.

Palavras Chave: *Eugenol, isoeugenol, espectroscopia Raman, cálculo DFT.*

Introdução

O principal componente do óleo de cravo-da-índia é o eugenol (4-Alil-2-Metoxifenol) e um dos compostos responsáveis pelo aroma da noz-moscada é o isoeugenol (2-metóxi-4-[(E)-prop-1-enil]fenol); ambos os compostos são isômeros de posição, em relação a uma ligação C=C alifática. Tais especiarias foram muito valiosas do ponto de vista histórico e comercial, e ainda hoje são importantes fontes de pesquisa, com diferentes possíveis aplicações para cada um dos compostos. O eugenol é largamente utilizado como anti-séptico, anti-inflamatório e analgésico na área médica e também odontológica¹. Acredita-se ainda no potencial antitumoral deste composto². O isoeugenol é utilizado na fabricação da vanilina, comercialmente valiosa, e tem sido estudado como substituto para o eugenol em cimentos dentários.

Desta forma, estudos sobre a caracterização e identificação espectroscópica dos isômeros, ainda não descrita na literatura, torna-se de fundamental importância para um grande segmento do setor produtivo, as indústrias farmacêutica e médica. Neste trabalho será efetuada a identificação dos isômeros através de diferentes técnicas espectroscópicas (Raman e infravermelho), suportadas por cálculos teóricos usando a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) para frequências Raman e infravermelho.



Resultados e Discussão

Eugenol e isoeugenol foram obtidos da Aldrich. Os espectros Raman foram obtidos com excitação em 1064 nm em espectrômetro Bruker RFS100; os espectros no infravermelho foram obtidos em um espectrômetro Bomem MB102. Todos os cálculos foram realizados com o pacote do programa Gaussian® utilizando o nível B3LYP com função de base 6-31G(d).

O eugenol possui várias conformações, cujas energias foram calculadas anteriormente²; no entanto, não foi feito um estudo comparativo com

relação ao seu isômero isoeugenol, nem com relação às atribuições vibracionais. O isoeugenol possui também diferentes conformações, e os resultados dos cálculos serão comparados com os experimentais.

A análise dos espectros Raman experimentais permite concluir que as bandas ν (C-H) aromáticas no eugenol (3067 cm^{-1} e 3005 cm^{-1}) são mais intensas que as mesmas no isoeugenol devido à ausência da conjugação da dupla alifática com o anel benzênico.

Outra característica relevante resulta da análise da banda ν (C=C) das duas estruturas. No eugenol, a presença da dupla isolada faz com que a banda seja observada em 1640 cm^{-1} , e aparece deslocada no isoeugenol para 1657 cm^{-1} ; percebe-se portanto, que a conjugação com o anel aromático aumenta o valor de número de onda da vibração da ligação C=C.

O espectro no infravermelho de ambos os compostos também apresenta diferenças na região de ν (C=C) aromático, entre 1645-1580 cm^{-1} , onde existe um dublete para o eugenol e uma banda para o isoeugenol, também devido a presença da deslocalização eletrônica no isoeugenol.

Os cálculos DFT estão em concordância com a estrutura planar do isoeugenol proposta anteriormente, e indica uma estrutura não planar para o eugenol; os resultados de números de onda para ambos corroboram as principais atribuições vibracionais.

Conclusões

A existência de bandas que definem cada estrutura foi obtida a partir da análise dos espectros experimentais, existindo assim a possibilidade de identificação destas espécies em matrizes mais complexas. A deslocalização eletrônica se mostra mais efetiva no isoeugenol, confirmação esta obtida via espectroscopia vibracional.

Agradecimentos

Ao CNPq, FAPEMIG, CAPES e UFJF.

Laekeman, G. M.; Van Hoof, L.; Haemers, A.; Vanden Berghe, D.; Herman, A. G.; Vlietinck, A. *J. Phytother. Res.* **1990**, *4*, 90.

² Olbert-Majkut, A.; Wierzejewska, M. *J. Phys. Chem. A* **2008**, *112*, 5691-5699