

## Otimização da estrutura do monômero da Quitosana por DFT para investigação de potencial aplicação como revestimento

Ramon da Conceição Fagundes<sup>1,2</sup> (IC), Júlia Marinho Trindade<sup>1,2</sup> (IC), Priscila Tamiasso-Martinhon<sup>1,2,3</sup> (PQ), Angela Sanches Rocha<sup>1,2,4</sup> (PQ), Daniel Lima Marques Aguiar<sup>1,2,5</sup> (PQ), Célia Sousa<sup>1,2,3</sup> (PQ)

<sup>1</sup>Grupo Interdisciplinar de Educação, Eletroquímica, Saúde, Ambiente e Arte, GIEESAA/UFRJ, <sup>2</sup>Grupo Interinstitucional e Multidisciplinar de Ensino, Pesquisa e Extensão em Ciências, GIMEnPEC/UFRJ <sup>3</sup>Programa de Programa de Mestrado Profissional em Química em Rede Nacional, PROFQUI/UFRJ. <sup>4</sup>Programa de Pós-Graduação em Química, PPGQ/UERJ., <sup>5</sup>Laboratório de Estudos em Ciências da Conservação, LECiC/UFRJ.

Palavras-Chave: Cálculos Teóricos, Biopolímero, Filmes, Eletrodo modificado.

### Introdução

A produção advinda da indústria pesqueira, hodiernamente, gera elevadas frações de resíduos sólidos, sobretudo, no ramo de processamento de crustáceos, a qual está atrelada às problemáticas ambientais do depósito destes. Neste sentido, uma das estratégias empregadas para mitigação dos impactos ambientais e para agregação de valor a este tipo de resíduos, trata-se da recuperação de alguns constituintes, tais como a quitina (QT), que pode ser transformada em quitosana (QTS).<sup>1</sup> A QTS, por tratar-se de um polímero natural, biodegradável, abundante na natureza, atóxico, de baixo custo e extraído de fontes renováveis, dispõem de grande potencial para empregos biotecnológicos, que garantem a versatilidade no processo de aplicações.<sup>1</sup> A QT pode ser desacetilada, gerando a QTS, que apresenta grupos amino polares e altamente reativos, agindo como sítios de adsorção e ancoragem, característica que torna este material tão versátil. É um polímero facilmente moldável, o que também facilita seu uso na forma de compósitos e revestimentos. Desta maneira, o objetivo deste trabalho é realizar otimização da geometria do monômero diamino da quitosana por intermédio de cálculos teóricos usando a Teoria do Funcional de Densidade (*Density Functional Theory*, DFT), como etapa preliminar no estudo da aplicação da quitosana na forma de revestimentos, especificamente na forma de filmes em eletrodos.

### Resultados e Discussão

Empregou-se a metodologia DFT para otimização das geometrias moleculares do monômero diamino da quitosana, partindo-se do fato de que a energia das espécies químicas é determinada por meio da densidade eletrônica, representada por funções de onda. Portanto, a densidade eletrônica é considerada como um observável, sendo possível viabilizar uma formulação conceitual menos abstrata da função de onda multi eletrônica total.

Alguns comprimentos de ligações foram calculados usando a base B3LYP/6.31G e o Gauss. A estrutura otimizada está apresentada na Figura 1, de modo que os átomos de carbono são as esferas cinza

escuro, hidrogênio cinza claro, oxigênio vermelho e nitrogênio azul.

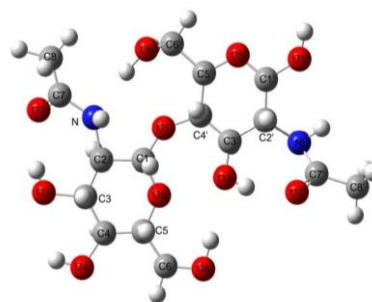


Figura 1. Geometria otimizada do monômero da quitosana empregando o software GaussView 6.

Os valores de distância de ligação C-O e C-N calculados e determinados experimentalmente, por meio da estrutura cristalográfica de alta resolução<sup>2</sup>, estão apresentados na Tabela 1. Verifica-se que os resultados calculados estão próximos dos determinados experimentalmente na literatura, com valores sistematicamente maiores, mas abaixo de 2%, o que pode ser considerado aceitável.

Tabela 1. Comprimentos de ligação na estrutura otimizada e da literatura.

Ligação	Valores calculados (Å)	Valores esperimentais <sup>2</sup> (Å)
C7 - O7	1,221 (1,45%)	1,239
C7' - N'	1,364 (1,20%)	1,347
C4' - O1	1,431 (0,35%)	1,436

### Conclusões

Cálculos teóricos podem ser uma ferramenta poderosa no estudo de materiais. Neste sentido, realizamos a otimização da estrutura do monômero diamino da quitosana, como etapa inicial do estudo deste biopolímero na forma de filmes em eletrodos.

### Agradecimentos

Agradecemos à CAPES, ao CNPq e à FAPERJ.

<sup>1</sup> Bessa-Junior, A. P., Gonçalves, A. A. *Acta of Fisheries and Aquatic Resources*, **2013**, 1, 1, 13.

<sup>2</sup> Sikorski, P., Hori, R., Wada, M. *Biomacromol.* **2009**, 10, 1100.