



**MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO**  
SECRETARIA DE EDUCAÇÃO PROFISSIONAL E TECNOLÓGICA  
INSTITUTO FEDERAL DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA  
GOIANO - CAMPUS URUTAÍ  
CURSO DE LICENCIATURA EM QUÍMICA



ZIOM DRAK SOUZA SILVA

**ESTUDO DE ESPECTROSCOPIA NA REGIÃO DO  
INFRAVERMELHO DO LAPACHOL, DA  $\beta$ -LAPACHONA E DO  
HIDROXI-HIDROLAPACHOL**



Urutaí – GO

Junho/2021

**ZIOM DRAK SOUZA SILVA**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à Banca Examinadora do Curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Goiano – Campus Urutaí, como parte dos requisitos necessários para obtenção do título de Licenciado em Química.

**Orientador:** Prof. Dr. Miquéias Gomes Ferreira

Urutaí – GO

Junho/2021



SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL  
MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
SECRETARIA DE EDUCAÇÃO PROFISSIONAL E TECNOLÓGICA  
INSTITUTO FEDERAL DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA GOIANO

Formulário 668/2021 - DE-UR/CMPURT/IFGOIANO

Estudo de espectroscopia na região do infravermelho do lapachol, da  
 $\beta$ -lapachona e do hidroxí-hidrolapachol

**Ziom Drak Souza Silva**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à Banca Examinadora do Curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Goiano – Campus Urutaí, como parte dos requisitos necessários para obtenção do título de Licenciado em Química.

Defendido e aprovado em 10/06/2021.

**Banca Examinadora**

*(assinado eletronicamente)*

**Prof. Dr. Miquéias Ferreira Gomes (IF Goiano/Urutaí) -Orientador e Presidente da Banca**

*(assinado eletronicamente)*

**Prof. Dr. Herbert Junior Dias (IF Goiano/Urutaí) - Examinador**

*(assinado eletronicamente)*

**Prof. Ms. Maxwell Severo da Costa (IF Goiano/Urutaí) - Examinador**

Documento assinado eletronicamente por:

- **Herbert Junior Dias, PROFESSOR ENS BASICO TECN TECNOLOGICO**, em 14/06/2021 10:51:07.
- **Maxwell Severo da Costa, PROFESSOR ENS BASICO TECN TECNOLOGICO**, em 14/06/2021 09:24:47.
- **Miqueias Ferreira Gomes, PROFESSOR ENS BASICO TECN TECNOLOGICO**, em 14/06/2021 08:54:27.

Este documento foi emitido pelo SUAP em 14/06/2021. Para comprovar sua autenticidade, faça a leitura do QRCode ao lado ou acesse <https://suap.ifgoiano.edu.br/autenticar-documento/> e forneça os dados abaixo:

Código Verificador: 279402  
Código de Autenticação: 5b857ea8b0



Campus Urutai  
Rodovia Geraldo Silva Nascimento, Km 2,5, Zona Rural, None, URUTAI / GO, CEP 75790-000  
(64) 3465-1900

Sistema desenvolvido pelo ICMC/USP  
Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)  
**Sistema Integrado de Bibliotecas - Instituto Federal Goiano**

SSI586 SOUZA, Ziom Drak Souza  
e ESTUDO DE ESPECTROSCOPIA NA REGIÃO DO  
INFRAVERMELHO DO LAPACHOL, DA B-LAPACHONA E DO  
HIDROXI-HIDROLAPACHOL / Ziom Drak Souza SOUZA;  
orientador Miquéias Ferreira Gomes . -- Urutaí, 2021.  
33 p.

TCC (Graduação em Licenciatura em Química) --  
Instituto Federal Goiano, Campus Urutaí, 2021.

1. Naftoquinonas. 2. Fármacos. 3. Caracterização  
Espectroscópica. 4. FT-IR. 5. Lapachol. I. Gomes ,  
Miquéias Ferreira, orient. II. Título.

**TERMO DE CIÊNCIA E DE AUTORIZAÇÃO PARA DISPONIBILIZAR PRODUÇÕES TÉCNICO-CIENTÍFICAS NO REPOSITÓRIO INSTITUCIONAL DO IF GOIANO**

Com base no disposto na Lei Federal nº 9.610/98, AUTORIZO o Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Goiano, a disponibilizar gratuitamente o documento no Repositório Institucional do IF Goiano (RIIF Goiano), sem ressarcimento de direitos autorais, conforme permissão assinada abaixo, em formato digital para fins de leitura, download e impressão, a título de divulgação da produção técnico-científica no IF Goiano.

**Identificação da Produção Técnico-Científica**

- |  |   |
|--|---|
| <input type="checkbox"/> Tese  | <input type="checkbox"/> Artigo Científico              |
| <input type="checkbox"/> Dissertação                                 | <input type="checkbox"/> Capítulo de Livro              |
| <input type="checkbox"/> Monografia – Especialização                 | <input type="checkbox"/> Livro                          |
| <input checked="" type="checkbox"/> TCC - Graduação                  | <input type="checkbox"/> Trabalho Apresentado em Evento |
| <input type="checkbox"/> Produto Técnico e Educacional - Tipo: _____ |   |

Nome Completo do Autor: Ziom Drak Souza Silva  
Matrícula: 2017101221530021

Título do Trabalho: Estudo de Espectroscopia na Região do Infravermelho do Lapachol, da  $\beta$ -lapachona e do Hidroxi-Hidrolapachol

**Restrições de Acesso ao Documento**

Documento confidencial:  Não  Sim, justifique: \_\_\_\_\_

Informe a data que poderá ser disponibilizado no RIIF Goiano: \_\_/\_\_/\_\_

O documento está sujeito a registro de patente?  Sim  Não


O documento pode vir a ser publicado como livro?  Sim  Não

**DECLARAÇÃO DE DISTRIBUIÇÃO NÃO-EXCLUSIVA**


O/A referido/a autor/a declara que:

- o documento é seu trabalho original, detém os direitos autorais da produção técnico-científica e não infringe os direitos de qualquer outra pessoa ou entidade;
- obteve autorização de quaisquer materiais incluídos no documento do qual não detém os direitos de autor/a, para conceder ao Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Goiano os direitos requeridos e que este material cujos direitos autorais são de terceiros, estão claramente identificados e reconhecidos no texto ou conteúdo do documento entregue;
- cumpriu quaisquer obrigações exigidas por contrato ou acordo, caso o documento entregue seja baseado em trabalho financiado ou apoiado por outra instituição que não o Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Goiano.

Local \_\_\_\_\_ Urutai \_\_\_\_\_, 07/07/2021.  
Data

  
Assinatura do Autor e/ou Detentor dos Direitos Autorais

Ciente e de acordo:

  
Assinatura do(a) orientador(a)



SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL  
MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
SECRETARIA DE EDUCAÇÃO PROFISSIONAL E TECNOLÓGICA  
INSTITUTO FEDERAL DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA GOIANO

Formulário 666/2021 - DE-UR/CMPURT/IFGOIANO

LICENCIATURA EM QUÍMICA  
COORDENAÇÃO DE TRABALHO DE CURSO

ATA DE DEFESA DO TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

Ata dos Trabalhos da Banca Examinadora do Trabalho de Conclusão de Curso (TC) do estudante **Ziom Drak Souza Silva** para obtenção do título de Licenciado em Química pelo Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Goiano – Campus Urutaí (IF Goiano/Urutaí). Integraram a Banca: **Prof. Dr. Herbert Junior Dias**, **Ms. Maxwell Severo da Costa** e **Prof. Dr. Miquéias Ferreira Gomes (orientador)**. Aos 10 (dez) dias do mês de junho de 2021 às 8 horas e 30 minutos realizou-se, via webconferência, a apresentação pública do TC pelo estudante. O orientador abriu a sessão agradecendo a participação dos membros da Banca Examinadora. Em seguida convidou o estudante para que fizesse a exposição do trabalho intitulado: “**Estudo de espectroscopia na região do infravermelho do lapachol, da  $\beta$ -lapachona e do hidroxí-hidrolapachol**”. Finalizada a apresentação, cada membro da Banca Examinadora realizou a arguição sobre o trabalho do estudante. Dando continuidade aos trabalhos, o orientador solicitou a todos que aguardassem enquanto a Banca Examinadora pudesse deliberar sobre o TC do candidato em outro ambiente virtual. Terminada a deliberação, o orientador leu a ata dos trabalhos declarando **aprovado** o TC do estudante. Em seguida, deu por encerrada a solenidade, da qual eu, **Miquéias Ferreira Gomes**, presidente da banca, lavrei a presente ata que vai assinada por mim e pelos demais membros da Banca Examinadora.

**Banca Examinadora**

*(assinado eletronicamente)*

**Prof. Dr. Miquéias Ferreira Gomes (IF Goiano/Urutaí)** -Orientador e Presidente da Banca

*(assinado eletronicamente)*

**Prof. Dr. Herbert Junior Dias (IF Goiano/Urutaí)** - Examinador

*(assinado eletronicamente)*

**Prof. Ms. Maxwell Severo da Costa (IF Goiano/Urutaí)** - Examinador

Documento assinado eletronicamente por:

- **Herbert Junior Dias**, PROFESSOR ENS BASICO TECN TECNOLOGICO, em 14/06/2021 12:04:43.
- **Maxwell Severo da Costa**, PROFESSOR ENS BASICO TECN TECNOLOGICO, em 14/06/2021 09:25:09.
- **Miqueias Ferreira Gomes**, PROFESSOR ENS BASICO TECN TECNOLOGICO, em 14/06/2021 08:33:28.

Este documento foi emitido pelo SUAP em 14/06/2021. Para comprovar sua autenticidade, faça a leitura do QRCode ao lado ou acesse <https://suap.ifgoiano.edu.br/autenticar-documento/> e forneça os dados abaixo:

Código Verificador: 279375  
Código de Autenticação: 30d1c5f5be



Campus Urutai  
Rodovia Geraldo Silva Nascimento, Km 2,5, Zona Rural, None, URUTAI / GO, CEP 75790-000  
(64) 3465-1900



## DEDICATÓRIA

Dedico esta conclusão de curso primeiramente a minha mãe, por finalmente ser capaz de realizar não só o meu sonho, mas o dela que sempre acreditou que a educação era uma das vias mais importantes para ter um futuro profissional com boas oportunidades. Jamais imaginaria que uma simples desafio de conseguir uma vaga em um curso superior em 2016, se tornaria uma oportunidade de mudar de vida.

Me lembro como ontem descobrindo uma Instituição de Ensino Superior por acaso no *google maps* e me inscrevendo nela sem a menor expectativa, e tendo sido aprovado. A alegria no olhar da minha mãe e seu incentivo para ingressar no curso apesar de ter que abdicar da presença dos meus pais, indo morar em outro Estado numa cultura inédita pra mim e tendo que lidar com a necessidade de torna-se independente.

Dedico esta conclusão ao O Instituto Federal Goiano Campus Urutaí que me acolheu e me forneceu condições de cursar a Licenciatura em Química dentro de sua capacidade, dos quais a experiência mudou profundamente a minha vida, e com muito orgulho carregarei o nome dessa Instituição por toda minha trajetória profissional.

Dedico também aos meus colegas de classe que me trouxeram momentos de alegria, me ensinaram indiretamente a ter resiliência e a estudar. Aos meus professores, Maxwell, Grazielle, Leandro, Elisabete, Jussana, Bruna, Felipe, Lucas, Debora, Pâmela, entre outros que acreditaram no meu potencial e me ajudaram cada um com suas particularidades, mas com o mesmo proposito aos quais dedicaram sua profissão. Perdoem se injustamente esqueci alguém, o pilar da minha formação esta alicerçado no trabalho docente de vocês.

Por último uma dedicação especial ao meu professor e orientador Miquéias, que virou minha concepção de organização e disciplina de cabeça pra baixo, com conselhos valiosos e exemplo de vida que vou carregar em memória e atitudes. Sou grato pela paciência, concelhos, apoio e pelo estilo peculiar de despertar determinação.

Dedico esta caminhada a mim, que lutei contra meus costumes errôneos de lidar com a vida, e provei para mim mesmo que não há dificuldade que a perseverança e esforço não supere!

## **AGRADECIMENTOS**

O papel desempenhado por todos aqui citados não cabem em palavras, porém não poderia deixar de cita-los pois minha caminhada foi repleta de percalços e essas pessoas fizeram total diferença na minha persistência. Gostaria de agradecer primeiramente a Deus, pela saúde, força e fé. Agradecer também a minha família por todo apoio e incentivo durante minha caminhada na graduação, principalmente a minha mãe, pelo carinho, apoio emocional, psicológico e financeiro, pois seus sábios conselhos fizeram eu adentrar no curso, permanecer nele apesar de todos os percalços e compreender que garra, dedicação e resiliência são fundamentais para o sucesso na vida.

Gostaria também de agradecer aos meus colegas de classe, que trouxeram uma diversidade cultural que agregou muito a minha concepção de mundo, assim como hábitos de estudo que me ensinaram o valor da responsabilidade e disciplina acadêmica, e não menos importante foram responsáveis por inúmeros momentos de descontração dos quais recordações levarei para toda a vida.

Gostaria de agradecer o corpo docente do curso de Licenciatura em Química criou um ambiente da família na minha graduação que já mais esquecerei e que me fez entender o valor de um profissional de educação e seu lado humano, muitas vezes esquecido durante a trajetória escolar. Foram responsáveis por não somente minha maturidade acadêmica, mas minha formação cidadã. Sou muito grato pela paciência e insistência pois eu entrei nesse curso sem se quer compreender química e hoje posso afirmar que além de formado me sinto criticamente preparado para lidar com o mundo que me cerca em esferas que vão além da acadêmica, meu muito obrigado, a profissão de vocês salva vidas.

Aqueles citados indiretamente ou diretamente, e me perdoem se injustamente esqueci de alguém, o meu muito obrigado a todos vocês!

“Sempre há limites, eu não conheço os meus.”

Uzain Bolt

## SUMÁRIO

1. Introdução.....	16
2. Revisão Bibliográfica .....	17
2.1. Naftoquinonas .....	17
2.2. Lapachol, $\beta$ -lapachona e hidroxí-hidrolapachol: estrutura, síntese e aplicações ....	19
2.3. FTIR na caracterização de substâncias orgânicas .....	21
3. Metodologia .....	22
4. Resultados e discussão.....	22
4.1. Análise do espectro de infravermelho do Lapachol .....	22
4.2. Análise do espectro de infravermelho da $\beta$ -lapachona.....	25
4.3. Análise do espectro de infravermelho do hidroxí-hidrolapachol.....	27
4.4. Análise do espectro de infravermelho do lapachol vs derivados .....	28
6. Bibliografia.....	31

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Estrutura molecular do lapachol, hidroxí-hidrolapachol e $\beta$ -lapachona. ....	16
Figura 2. Estrutura da Quinona ( $\rho$ ) para e (o) orto respectivamente. ....	17
Figura 3. Efeito tautomerico (ceto-enol) 1,4-naftoquinona.....	18
Figura 4. Grupo principal de quinonas monoméricas. ....	19
Figura 5. Síntese da $\beta$ -lapachona. ....	20
Figura 6. Síntese da $\beta$ -lapachona através da adição de Michael. ....	20
Figura 7. Espectro de FTIR do lapachol obtido em pastilhas de KBr. ....	23
Figura 8. Representação do tautomerismo do lapachol em um equilíbrio ceto-enólico. .	24
Figura 9. (a) Bandas harmônicas de anel aromático orto dissubstituído segundo literatura. (b). Espectro de FTIR do lapachol ampliada na região de 2000- 1600 $\text{cm}^{-1}$ .....	24
Figura 10. Espectro de FTIR do lapachol obtido em pastilhas de KBr. ....	26
Figura 11. Espectro de FTIR do hidroxí-hidrolapachol obtido em pastilhas de KBr. ....	27

## RESUMO

O território nacional dispõe de uma grande variedade de biomas, em especial o cerrado, em uma área que se estende do Mato Grosso ao Paraná. A *Tabebuia avellanae*, da ordem dos *bignoniaceae*, é comum nesse bioma tendo como características árvores entre 10 a vinte metros de altura de floração vistosa. Conhecida também como Ipê-roxo, apresenta compostos de interesse medicinal devido a presença de compostos químicos presente no cerne de seu tronco, como antraquinonas, iridóides e naftoquinonas que são compostos de metabolismo secundário agindo como pesticidas naturais entre outras funções. Dentre esses compostos o Lapachol e os derivados  $\beta$ -lapachona e hidroxihidrolapachol, estão presentes em processos bioenergéticos da respiração e fotossíntese tendo o papel de transportadores elétrons entre as membranas proteicas. Suas propriedades farmacológicas tem despertado interesse em pesquisas nacionais e internacionais de síntese e aplicação diversas, tendo estudos comprovados de sua ação, anti inflamatória, antifúngicas, anticancerígenos entre outras. Nesse sentido tomando ciência das diversas aplicabilidades do lapachol e seus derivados o presente trabalho teve como objetivo realizar sua caracterização espectroscópica por espectroscopia na região do infravermelho com transformada de Fourier (do inglês *Fourier Transform Infrared – FTIR*). A escolha dessas substâncias esta atreladas a linha de pesquisa que vem sendo desenvolvida pelo grupo de pesquisa do Laboratório de Orgânica e Eletroanalítica (LOE), coordenado pelo Prof. Dr. Miquéias Ferreira Gomes, no qual o trabalho foi desenvolvido.

**Palavras-chave:** Naftoquinonas, fármacos, Caracterização Espectroscópica, FT-IR, Lapachol.

## ABSTRACT

The national territory has a wide variety of biomes, especially the cerrado, in an area that extends from Mato Grosso to Paraná. *Tabebuia*, from the order of the *bignoniaceae*, is a common tree in this biome and is characterized by forming trees from ten to twenty meters in height with showy flowering. Also known as Ipe, it presents compounds of medicinal interest due to the presence of chemical compounds present in the core of its trunk, such as anthraquinones, iridoids and naphthoquinones. Among these compounds, Lapachol and the derivatives  $\beta$ -lapachone and hydroxy-hydrolapachol are present in bioenergetic processes of respiration and photosynthesis, having the role of electron transporters between protein membranes. Its pharmacological properties have aroused interest in national and foreign researches of different synthesis and application, with proven studies of its action, anti-inflammatory, antifugic, anticancer, among others. In this sense, being aware of the various applicability of lapachol and its derivatives, the present work aimed to carry out its spectroscopic characterization by spectroscopy in the infrared region with Fourier transform (Fourier Transform Infrared – FTIR). The choice of these substances is linked to the line of research that has been developed by the research group of the Organic and Electroanalytical Laboratory (LOE), coordinated by Prof. Dr. Miqueias Ferreira Gomes, in which the work was developed.

**Keywords:** Naphthoquinones, Drugs, Spectroscopic Characterization, FT-IR, Lapachol.

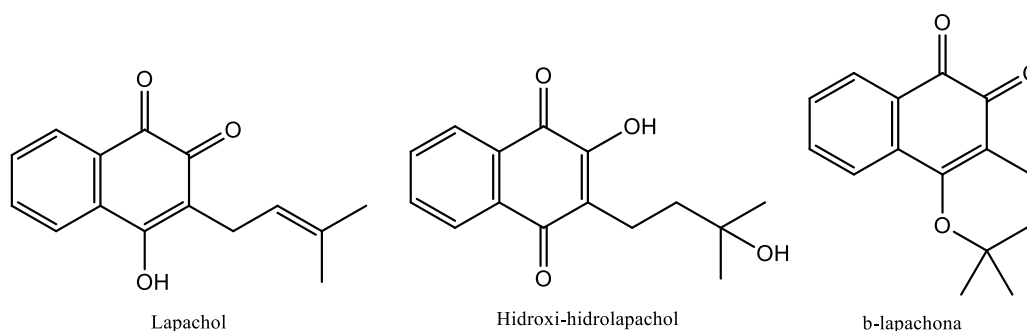
## 1. INTRODUÇÃO

O Brasil dispõe de uma grande variedade de biomas, em especial o cerrado, cujo área se estende do Mato Grosso ao Paraná. A *Tabebuia*, da ordem dos *bignoniaceae*, é uma árvore comum nesse bioma e se caracterizam por formar árvores de dez a vinte metros de altura de floração vistosa (LEILA et al, 2012). Também chamadas de ipês, essas árvores são também fontes de estudo medicinais devido aos compostos químicos presente no cerne de seu tronco, com destaque para as antraquinonas, os iridóides, e as naftoquinonas (GARCEZ et al 2007).

A estrutura das naftoquinonas apresentam uma variedade de isômeros, que influencia na posição de suas carbonilas resultando em diferentes atuações biológicas. As substâncias lapachol,  $\beta$ -lapachona e hidroxi-hidrolapachol, por exemplo, são naftoquinonas de interesse farmacológico devido, principalmente, a suas propriedades antimicrobiana e antitumorais (AMININ e POLONIK, 2019).

A estrutura molecular desses compostos é caracterizada pela presença de um anel de 6 carbonos com ligações duplas alternadas conhecidos como anel aromático, contendo ao menos duas funções carbonila, tendo em sua vizinhança outro anel aromático a esquerda e uma ramificação cíclica ou acrílica a direita, como mostra a Figura 1. A  $\beta$ -lapachona e o hidrodi-hidrolapachol podem ser obtidos a partir do lapachol em condições adequadas (BARBOSA e NETO, 2013).

Figura 1. Estrutura molecular do lapachol, hidroxi-hidrolapachol e  $\beta$ -lapachona.



Fonte. Autor.

Diante dos inúmeros estudos sobre as diversas aplicabilidades do lapachol e seus derivados o presente trabalho teve como objetivo realizar sua caracterização espectroscópica por espectroscopia na região do infravermelho com transformada de



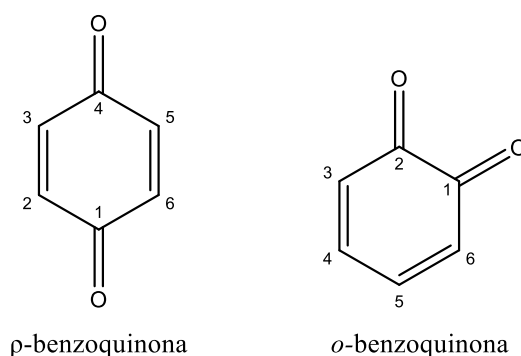
Fourier (do inglês *Fourier Transform Infrared* – FTIR). A escolha dessas substâncias esta atreladas a linha de pesquisa que vem sendo desenvolvida pelo grupo de pesquisa do Laboratório de Orgânica e Eletroanalítica (LOE), coordenado pelo Prof. Dr. Miquéias Ferreira Gomes, no qual o trabalho foi desenvolvido.

## 2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

### 2.1. Naftoquinonas

As naftoquinonas pertencem a um grupo de derivações das quinonas. J. D. Hooker no século XIX foi pioneiro na determinação molecular das quinonas através do seu estudo com lapachol. Outra considerável contribuição na caracterização e síntese de quinonas envolviam estudos de *orto* e *para* quinonas produzidos por Fiezer por volta de 1927 (SOUZA, 2007). A estrutura básica de uma quinona consiste em um anel aromático de 6 carbonos, contendo duas funções carbonilas, ou seja, ligação C=O) que podem estar dispostas em posição *para* nos carbonos 1 e 4, ou *orto*, situando-se ambas de forma adjacente no carbono 1 e 2 conforme Figura 2.

Figura 2. Estrutura da Quinona (*p*) para e (*o*) orto respectivamente.

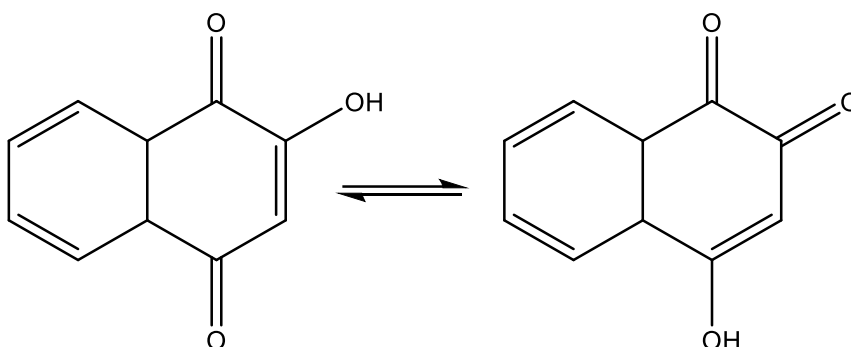


Fonte. Autor.

A reatividade das carbonilas tem ligação direta com os pares de elétrons livres do oxigênio da carbonila e a densidade de carga positiva em carbonos do anel benzênico, permitindo a quinona agir como eletrófilo e oxidante (SOUZA et al, 2016). Outra

característica interessante da quinona e seu efeito tautomérico (Figura 3) que é favorecido de acordo com demais substituintes presentes no anel e pH específico do meio, como por exemplo a 1,4-naftoquinona.

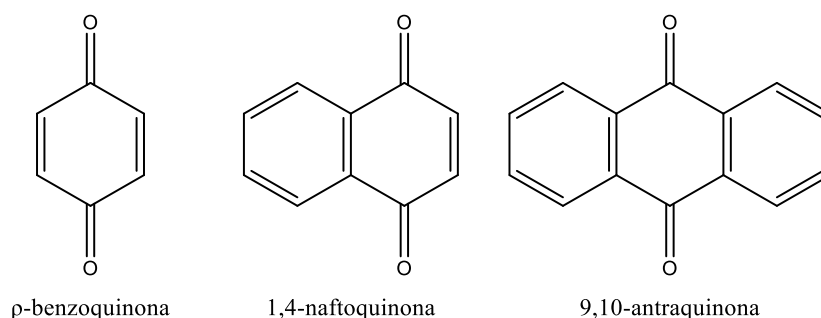
Figura 3. Efeito tautomerico (ceto-enol) 1,4-naftoquinona.



Fonte. Autor.

O grupo principal das quinonas pode ser dividido em benzoquinonas, naftoquinonas e antraquinonas, ilustradas na Figura 4. Estudos *in vitro* apontam a reatividade das Quinonas em determinadas condições no sistema biológico, promovendo a oxidação de macromoléculas, formação de radicais, peróxidos entre outras substancias reativas e tendo também propriedades carcinogêneas, que estão relacionadas a diversas doenças como o câncer (MILARÉ, 2018). Porém suas propriedades oxidantes permitem agir como fármacos, tornando uma molécula de característica peculiar. A 1,4 – naftoquinona por exemplo estão presentes em processos bioenergéticos da respiração e fotossíntese tendo o papel de transportadores elétrons entre as membranas proteicas (Hellwing, 2015). Estudos comprovam que antraquinonas possuem capacidade anti inflamatória, regulando a ação de células imunológicas como basófilos e macrófagos (NIAZ et al, 2020).

Figura 4. Grupo principal de quinonas monoméricas.



Fonte. Autor.

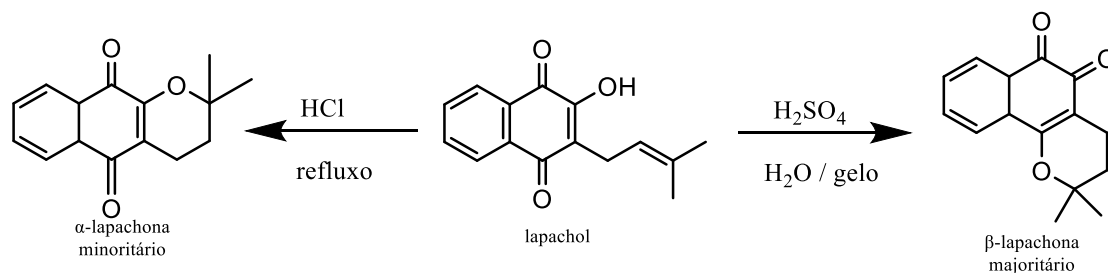
As características farmacológicas das quinonas em geral tem despertado o interesse dos pesquisadores. Sendo sua variabilidade isomérica e derivados fonte de diversas substâncias com aplicabilidade na área da saúde e indústria. O estudo das propriedades químicas, físicas e de síntese são peça chave nos avanços de sua aplicabilidade.

## 2.2. Lapachol, $\beta$ -lapachona e hidroxil-hidrolapachol: estrutura, síntese e aplicações

A lapachol apresenta uma estrutura de naftoquinona com um ramificação 2-metil-but-2-eno, sendo uma espécie de baixa protonação, neutra, possui capacidade oxidante e eletrolítica, (SAVYO, 2016). Em temperatura ambiente na sua forma ácida, ou seja, com hidroxila na posição *para* do anel quinona, consiste em um sólido amarelo, pouco solúvel em água segundo Barbosa e Neto (2013), tendo ponto de fusão na faixa de 139,5-140,7 °C conforme literatura. Através da serragem das árvores do gênero *Tabebuia*, a sua síntese pode ser realizada através de soluções alcalinas, com carbonato de sódio ( $\text{Na}_2\text{CO}_3$ ) ou bicarbonato de sódio ( $\text{NaHCO}_3$ ) e em seguida tratada com ácido clorídrico resulta no precipitado amarelo característico do lapachol.

A partir da síntese do Lapachol pode-se obter o derivado  $\beta$ -lapachona (7,8-benzo-2,2-dimetil-3,4-dihidro-5,6-oxo-2H-cromeno), que também podem ser encontrados na família do *Bignoniaceae*, diferindo-se do lapachol a partir da ciclização do radical alifático, processo esse catalisado por ácido em baixa temperatura, preferencialmente o  $\text{H}_2\text{SO}_4$  produz majoritariamente a configuração beta ( $\beta$ ) conforme Figura 5 (FERREIRA et al, 2010).

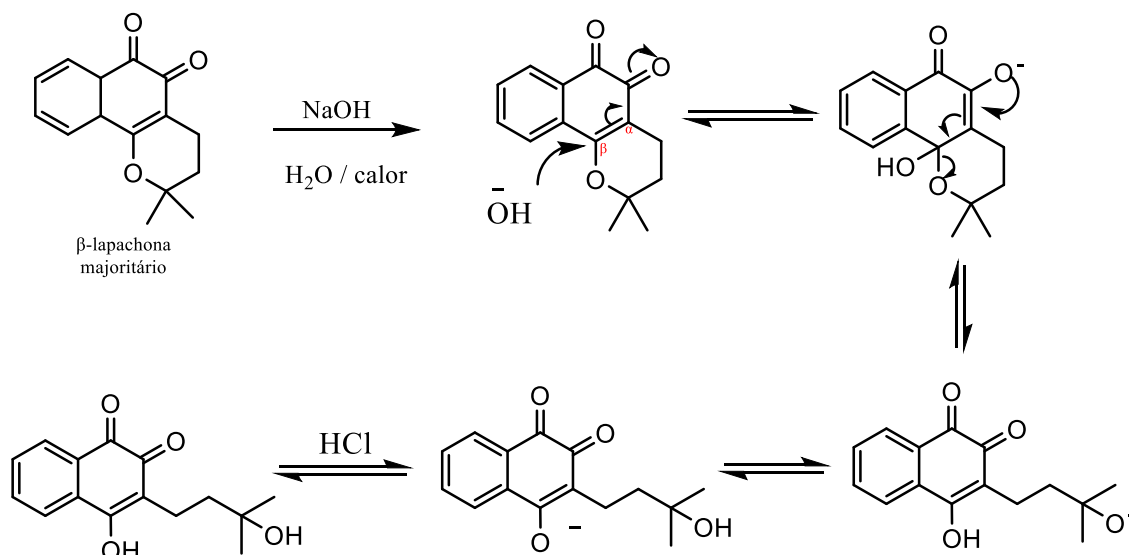
Figura 5. Síntese da  $\beta$ -lapachona.



Fonte. Autor.

Utilizando a  $\beta$ -lapachona é possível sintetizar o hidroxí-hidrolapachol (2-hidroxí-3-(3-hidroxí-3-metilbutil)naftaleno-1,4-diona), através do aquecimento em meio alcalino, como o hidróxido de sódio (NaOH), promove a abertura do anel heterocíclico através adição de Michael seguida de tratamento com ácido exemplificado na Figura 6. (BARBOZA E NETO, 2013).

Figura 6. Síntese da  $\beta$ -lapachona através da adição de Michael.



Fonte. Adaptada de BARBOZA E NETO, 2013.

Estudos sobre a atividade farmacológica do lapachol e seus derivados apontam características de atuação biológicas no tratamento de doenças, no Brasil pesquisas como

essa tem ganhado espaço, o lapachol e derivados são agentes oxidante eficiente em sistemas biológico devido a formação de radicais e superóxidos causando estresse oxidativos em células malignas como as cancerígenas, e células benéficas do corpo em alguns casos segundo EL-NAJJAR et al (2011). possui também ação antifugicida como inibidor de fungos patogênicos em plantações de soja (Araujo, 2019), utilizado contra doenças como leishmaniose (ROBERT et al 2018). Essas propriedades farmacológicas entre outras que tornam esse grupo de compostos de naftoquinonas fonte de estudos frequentes ao redor do mundo.

### 2.3. FTIR na caracterização de substâncias orgânicas

As substâncias orgânicas em sua grande maioria absorvem e refletem radiação eletromagnética do meio ao seu redor por intermédio das suas ligações. Faixas específicas de radiação promovem diferentes tipos de interações, sendo o infravermelho característico em promover vibrações nas ligações entre os átomos da molécula (LIMA e BAKKER, 2011). As regiões espectrais do Infravermelho são divididas em Infravermelho distante (FIR, do inglês *far-infrared*), médio (MIR, do inglês *mid-infrared*) e próximo (NIR, do inglês *near-infrared*), tendo como parâmetro de distância a região de compreende a luz visível que vai de 400 a 750 nm.

A região do infravermelho médio de comprimento de 2500 a 500 ( $\lambda$ ) nm, cujo comprimento de onda corresponde de 4000 a 400  $\text{cm}^{-1}$ , apresenta interação mensurável em compostos orgânicos. As moléculas absorvem a energia quantizada dessa faixa de radiação do MIR provocando um estado de excitação de mais alta energia que induz vibrações de estiramento e dobramento, entre outras, em suas ligações, em comprimentos condizentes com a vibração natural de seus tipos de ligações, grupamento e estrutura, criando dessa forma uma identidade da molécula numa faixa de comprimento de onda na região MIR.

A análise espectroscópica no infravermelho utiliza-se de um espectrofotômetro infravermelho que incide uma frequência específica de radiação infravermelha em um amostra na mesma faixa de vibração natural das ligações na molécula, dessa forma promove aumento da amplitude vibracional dessas ligações que só pode ocorrer desde que o momento dipolo da molécula seja variável, ou seja moléculas diatômica

homonucleares como  $\text{Cl}_2$  não apresentam aumento vibracional com a incidência do MIR devido ao seu momento dipolo nulo. Após incidir a radiação, a quantidade da radiação remanescente após absorção indica uma resposta da radiação, e características vibracionais específicas de cada molécula é capaz de estabelecer padrões de comprovação estrutural através da análise feita por um espectrofotômetro (SILVERSTEIN et al, 2000).

Portanto os espectrofotômetros ou espectrômetros de infravermelho apresentam 2 tipos comumente utilizados em análises espectroscópicas FTIR, os instrumentos dispersivos e transformada de Fourier (FT). a diferença entre ambos reside no tempo de análise, devido ao processo de emissão das diferentes frequências do infravermelho ser realizado por uma técnica mais avançada no FTIR reduzindo o tempo de análise e aumentando a nitidez do espectro obtido. (PAVIA et al, 2013).

### **3. METODOLOGIA**

A análise espectroscópica FTIR para todos os compostos de interesse, foi realizada através da colaboração do Laboratório de orgânica e eletroanalítica, e utilizando-se das amostras de lapachol e derivados obtidas do trabalho da atual licenciada Ginadrya Rodrigues Araujoda, os compostos foram devidamente maceradas em porções de aproximadamente 2 mg de cada composto com brometo de potássio (KBr) e prensado. A pastilha formada foi então analisada por um espectrofotômetro Affinity-1 da Shimadzu, disponível no Núcleo de Química do IF Goiano – Campus Urutaí, obtendo espectros FTIR com leituras de 4000 a 400  $\text{cm}^{-1}$  e 16 varreduras.

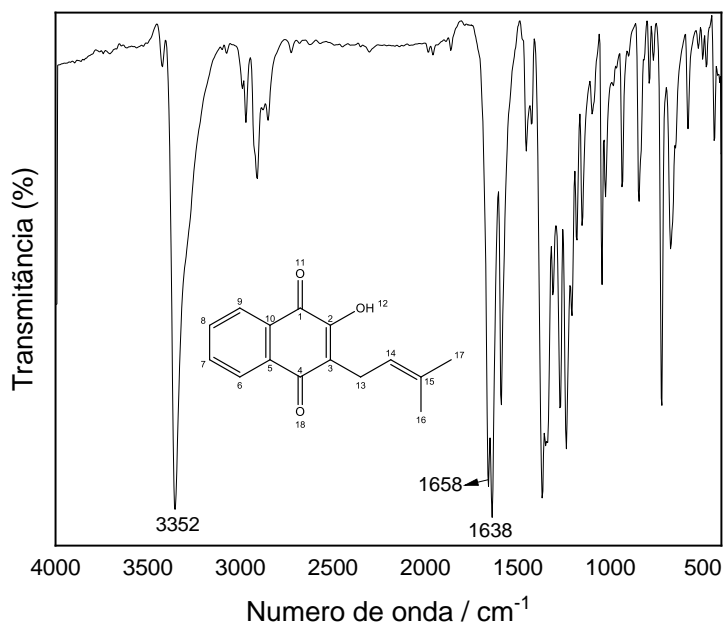
### **4. RESULTADOS E DISCUSSÃO**

#### **4.1. Análise do espectro de infravermelho do Lapachol**

O espectro FTIR Lapachol (Figura 7) apresenta banda intensa características de grupamentos O – H em 3352  $\text{cm}^{-1}$ , segundo literatura a faixa de 3500  $\text{cm}^{-1}$  a 3100  $\text{cm}^{-1}$  contém ocorrências de bandas de ligação de hidrogênio e O – H livre. Em seguida os sinais na região 3100 - 2700  $\text{cm}^{-1}$  são característicos de deformações simétricas e

assimétricas de C – H  $sp^2$  e  $sp^3$ , referentes a ramificação alifática e anel benzênico da estrutura da naftoquinona.

Figura 7. Espectro de FTIR do lapachol obtido em pastilhas de KBr.

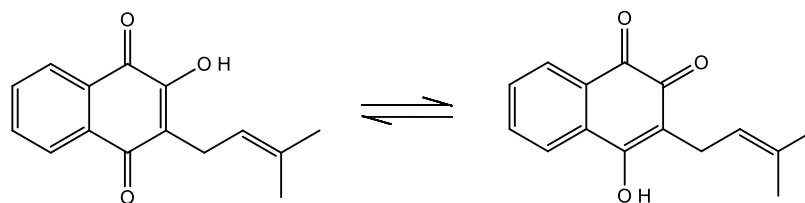


Fonte. Autor.

O lapachol contém ligação C=O nas posições 1,4 que pode alternar de função com a hidroxila no carbono 2 por efeito ceto-enólico conforme Figura 8. Essa característica é

confirmada com as bandas para as duas ligações C=O em posições *para* no carbono 1 e 4 do anel do lapachol em  $1658\text{ cm}^{-1}$  e  $1638\text{ cm}^{-1}$ , sendo características de cetona conjugadas.

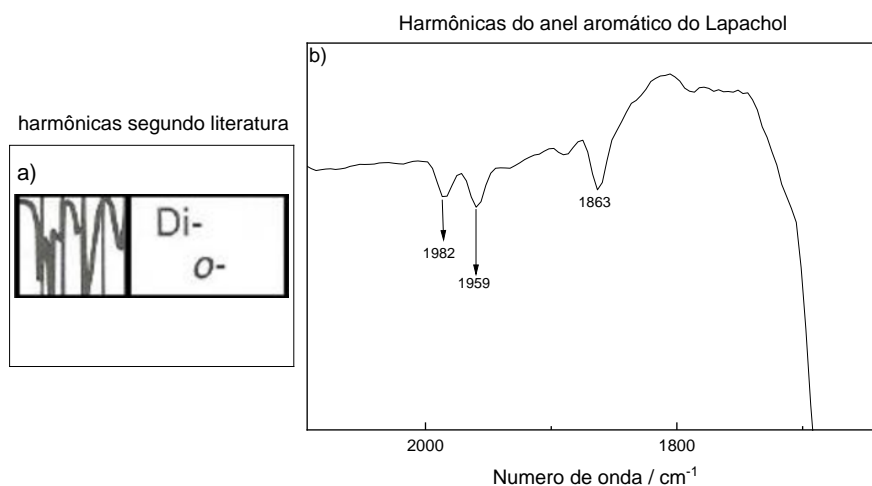
Figura 8. Representação do tautomerismo do lapachol em um equilíbrio ceto-enólico.



Fonte. Autor.

Analisando o espectro harmônicas na região de  $2000$  a  $1667\text{ cm}^{-1}$  como mostra a Figura 9, pode-se afirmar que o anel aromático apresenta dissustituição que somadas a banda de deformação angular em  $720\text{ cm}^{-1}$  que comprova a *orto* substituição do anel aromático.

Figura 9. (a) Bandas harmônicas de anel aromático orto dissustituído segundo literatura. (b) Espectro de FTIR do lapachol ampliada na região de  $2000$ -  $1600\text{ cm}^{-1}$ .



Fonte. (a) Introdução a espectroscopia, (PAVIA et al. 2013) (b) Autor.



Há também a bandas que confirmam a estrutura do radical alifático, com banda de deformação axial C=C em 1589 cm<sup>-1</sup> característico de iso metil-propeno tri substituído apesar de estar número de onda 1000 cm<sup>-1</sup> abaixo do previsto. É observado também duas bandas próximas em 1369 e 1350 cm<sup>-1</sup> que são comuns em cadeias carbônicas com metil germinal como no caso do iso metil-propeno presente na molécula do lapachol. A Tabela 1 sintetiza as principais bandas observadas no espectro FTIR do lapachol.

**Tabela 1.** Valores experimentais de número de onda (cm<sup>-1</sup>) do lapachol.

Número de onda cm <sup>-1</sup>	Atribuição
3352	VOH
2000-1667	VC=Carom.
1658	VC=O
1638	VC=O
1589	VC=Trisubst.
1369	VC-CH3 Geminal
1350	VC-CH3 Geminal
720	⊖Aroma

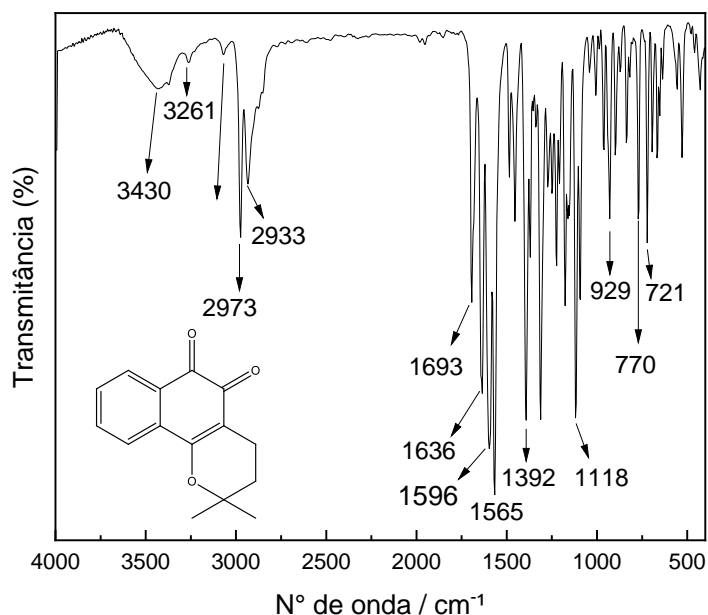
v = estiramento, ω = dobramento, Aroma= anel aromático

#### 4.2. Análise do espectro de infravermelho da β-lapachona

O espectro FTIR da β-lapachona (Figura 10) apresenta em 3430 e 3261 cm<sup>-1</sup>, estiramento cetona C=O, apesar de ser facilmente confundida com interação intermolecular O – H do efeito ceto-enol, e de uma possível presença de derivados que contenha hidroxila, influenciando na intensidade desse sinal.

Os sinais em 2933 cm<sup>-1</sup> e 2973 cm<sup>-1</sup> são característicos de estiramento C – H carbonos sp<sup>2</sup> provenientes dos anéis aromáticos da naftoquinona. As bandas confirmações de ressonância de anéis aromáticos na faixa característica assim como o lapachol apresentam sinais na faixa de 2000 a 1667 cm<sup>-1</sup> similar ao lapachol confirma a *orto* e *para* substituição do anel aromático. As bandas em 1596 e 1565 cm<sup>-1</sup> são características de estiramento C=C aromático.

Figura 10. Espectro de FTIR do lapachol obtido em pastilhas de KBr.



Fonte. Autor.

Na região de aproximadamente  $1400 - 1000 \text{ cm}^{-1}$  são característica de deformações axial assimétrica e simétrica de éter, portanto,  $1392$  e  $1118 \text{ cm}^{-1}$  são estiramento C-O-C, essa região também apresenta sinais para alcanos simples serem nesta mesma faixa, conforme literatura. A tabela 2 apresenta as bandas observadas no espectro da  $\beta$  – lapachona.

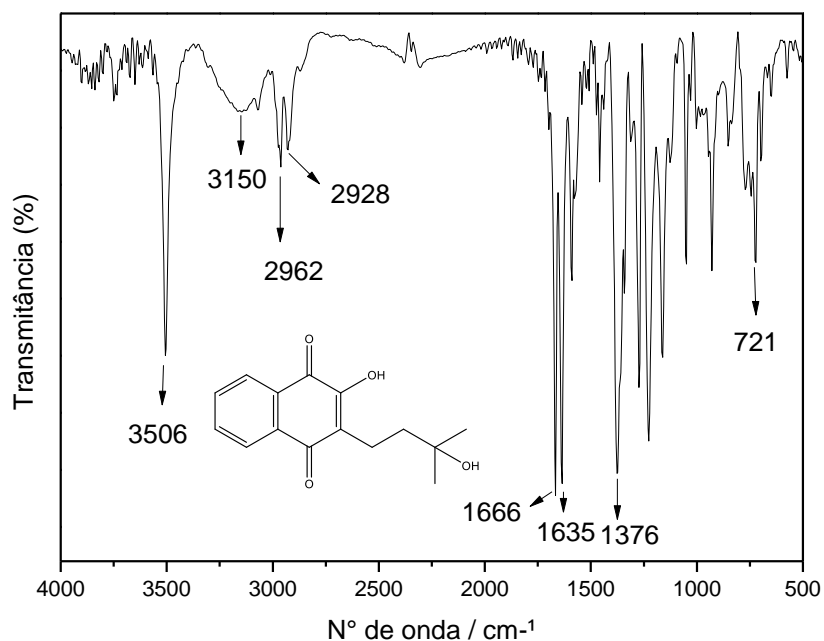
**Tabela 2.** Valores experimentais de comprimento de onda ( $\text{cm}^{-1}$ ) do  $\beta$  – lapachona

Comprimento de onda $\text{cm}^{-1}$	Atribuição
$3430 \text{ cm}^{-1}$	VC=O
$3261 \text{ cm}^{-1}$	VC=O
$2973 \text{ cm}^{-1}$	VC-C
$2933 \text{ cm}^{-1}$	VC-C
$1689 \text{ cm}^{-1}$	VC=O
$1636 \text{ cm}^{-1}$	VC=O
$1596 \text{ cm}^{-1}$	VC=C
$1565 \text{ cm}^{-1}$	VC=C
$1392 \text{ cm}^{-1}$	VC-O-C
$1118 \text{ cm}^{-1}$	VC-O-C
$929 \text{ cm}^{-1}$	$\omega_{\text{Aroma}}$
$770 \text{ cm}^{-1}$	$\omega_{\text{Aroma}}$
$721 \text{ cm}^{-1}$	$\omega_{\text{Aroma}}$

### 4.3. Análise do espectro de infravermelho do hidroxi-hidrolapachol

O espectro FTIR do Hidroxi-hidro lapachol (Figura 11) apresenta banda intensa em  $3506\text{ cm}^{-1}$  característico de ligação O – H livre de interação intermolecular provavelmente do hidrogênio na cadeia alifática da molécula, seguido de uma banda larga de baixa intensidade em  $3150\text{ cm}^{-1}$  de ligação O – H com interação intermolecular de ligação de hidrogênio. Em  $2962 - 2968\text{ cm}^{-1}$  são bandas de estiramento de C – H  $\text{sp}^2$  e C – H  $\text{sp}^3$ .

Figura 11. Espectro de FTIR do hidroxi-hidrolapachol obtido em pastilhas de KBr.



Fonte. Autor.

Conforme observado no espectro, apresenta banda de dobramento C – H<sub>3</sub> em aproximadamente  $1376\text{ cm}^{-1}$  correspondente ao grupamento metila (CH<sub>3</sub>) da ramificação do hidroxi-hidrolapachol apresenta bandas em aproximadamente  $1376\text{ cm}^{-1}$  estando em confirmade com a literatura conforme observado no espectro

**Tabela 3.** Valores experimentais de comprimento de onda ( $\text{cm}^{-1}$ ) do hidroxí-hidrolapachol.

Comprimento de onda $\text{cm}^{-1}$	Atribuição
3506 $\text{cm}^{-1}$	$\nu_{\text{C=O}}$
3150 $\text{cm}^{-1}$	$\nu_{\text{C=O}}$
2962 $\text{cm}^{-1}$	$\nu_{\text{C-C}}$
2928 $\text{cm}^{-1}$	$\nu_{\text{C-C}}$
1666 $\text{cm}^{-1}$	$\nu_{\text{C=O}}$
1635 $\text{cm}^{-1}$	$\nu_{\text{C=O}}$
1376 $\text{cm}^{-1}$	$\omega_{\text{C-H}}$
721 $\text{cm}^{-1}$	$\omega_{\text{Aroma}}$

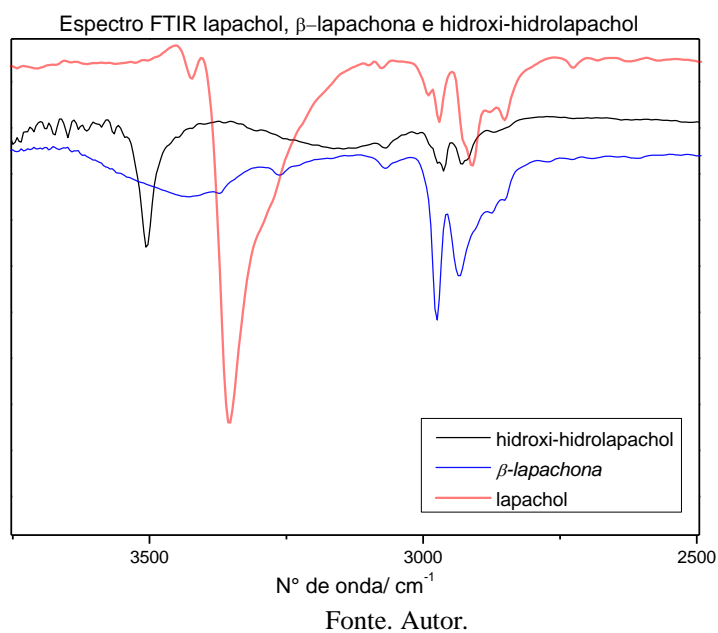
$\nu$  = estiramento,  $\omega$  = dobramento, Aroma= anel aromático

#### 4.4. Análise do espectro de infravermelho do lapachol vs derivados

O hidroxí-hidro lapachol tem estrutura muito semelhantes ao do lapachol, dessa forma seus espectros FTIR são de difícil distinção, no entanto algumas características os diferem. As bandas de confirmação de O – H livre estão presente em ambos, porém o hidroxí-hidrolapachol apresenta banda de interação intermolecular O – H entre 3500 e 3150  $\text{cm}^{-1}$ , são características presentes de hidroxila alifática do seu radical hidroxí.

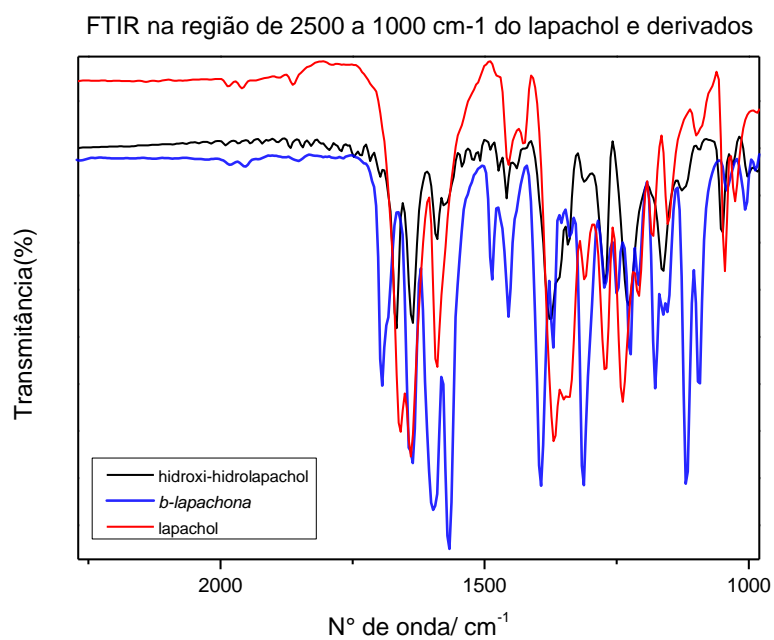
A  $\beta$ -lapachona apresenta uma banda de confirmação de interação intermolecular de O – H que pode também sofrer influência da confirmação de C=O em 3150 $\text{cm}^{-1}$ , sendo outra característica marcante as bandas menos definidos para C – H carbono  $\text{sp}^3$  ciclização do radical alifático em relação as presentes nos outros dois compostos.

**Figura 12.** FTIR da região de 4000  $\text{cm}^{-1}$  a 2500  $\text{cm}^{-1}$  do lapachol e derivados.



Na região de 2500 a 1000  $\text{cm}^{-1}$  as bandas observadas para os espectros do Lapachol e hidroxi-hidrolapachol apresentam harmônicas entre 2000 e 1666 $\text{cm}^{-1}$  muito semelhantes como mostrado na figura 13, isso devesse a substituições no anel aromático serem nas mesmas posições, na a  $\beta$ -lapachona esse sinal de harmônica difere devido a estrutura heterocíclica ligada ao anel quinona.

**Figura 13.** FTIR da região de 2500  $\text{cm}^{-1}$  a 1000  $\text{cm}^{-1}$  do lapachol e derivados.



Fonte. Autor

Em regiões de confirmação da presença de funções carbonílicas, a literatura prevê valores mais altos para cetona e valores inferiores para ésteres, comprovando que a energia para que esta vibração ocorra seja maior para ligações C=O do que para C-O-C cetona e éster proveniente de estiramento. Sendo portanto esse um ponto fundamental de diferenciação entre o sinal de éster na região de 1390-1100cm<sup>-1</sup> β-lapachona, em relação ao sinal de cetona presente nos 3 compostos. Devido a quantidade de sinais que ocorrem nessa faixa o presente trabalho buscou focar nos de maior distinção pois os compostos apresentam similaridades estruturais resultando em sinais semelhantes com deslocamentos sutis, tornando essa região de difícil análise.

## 5. CONCLUSÃO

O trabalho de caracterização do lapachol, hidroxilapachol e β-lapachona só foi possível graças a contribuição dos integrantes do grupo de pesquisa do Laboratório de Orgânica e Eletroanalítica (LOE), coordenado pelo Prof. Dr. Miquéias Ferreira Gomes, que extraíram e purificaram os compostos analisados. Assim como o laboratório de química orgânica do Instituto Federal Goiano – Campus Urutaí que dispunham do equipamento de análise espectroscópica FTIR. Os ensaios de análise FTIR foram realizados no período de pandemia, não sendo possível réplicas a fim de verificar interferências de impureza, porém pautando-se pela literatura foi possível compreender e discutir aspectos fundamentais das principais bandas de caracterização. A manipulação do *software* de tratamento de espectro, *Origin* permitiu compreender com clareza os detalhes estruturais do espectro permitindo uma discussão mais consciente, que fora estudado teoricamente na graduação.

Porém é válido ressaltar que apenas a análise FTIR tem a capacidade de confirmar grupos funcionais e estruturas prováveis nas substâncias analisadas, sendo considerado uma técnica complementar para confirmação de estrutura e grupamentos, esse aspecto fora previsto no escopo desse projeto de conclusão de curso, dessa forma sendo previstas a adição de análises de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) e Ultra violeta visível UV-vis que em conjunto complementariam a caracterização dos compostos de interesse.

Porém a pandemia de COVID-19 que assolou todo o mundo resultando em medidas de distanciamento social que acarretando na suspensão do calendário acadêmico em março de 2020 e posteriormente o início da continuidade do calendário de forma remota em julho de 2020, inviabilizaram diversas etapas do presente trabalho.

O presente trabalho através da caracterização espectroscópica do Lapachol,  $\beta$ -lapachona e hidroxí-hidrolapachol buscar agregar outros trabalhos científicos que possam vir a contribuir para o bem estar da sociedade com avanços, seja na área da saúde ou em processos industriais graças a estes compostos derivados de uma espécie vegetal árvore comum em nosso território.

## 6. BIBLIOGRAFIA

- AMININ, D.; POLONIK, S. 1,4 – Naphthoquinones: Some Biological Properties and Application. **Chem Pharm. Bull.** v. 68. n. 1. 2020, p.46-57.
- ARAUJO, G. R. **Lapachol,  $\beta$ -lapachona e Hidroxí-hidrolapachol: Extração, Síntese, Caracterização e Aplicação como Inibidores do Crescimento de Fungos Patogênicos da Soja.** IF GOIANO Campus-Urutaí. Goías, 2019.
- BARBOSA, T. P.; NETO, H. D. Preparação de Derivados do Lapachol em Meio Básico: Uma Proposta de Experimentos para a Disciplina de Química Orgânica Experimental. *Química Nova*, v. 36, n. 2. Faculdade de Ciências Médicas da Paraíba. João Pessoa, 2013, p.331-334.
- EL-NAJJAR, N.; GALI-MUHTASIB, H.; KETOLA, R. A.; VUORELA, P.; URTTI, A.; VUORELA, H. The Chemical and Biological Activities of Quinones: overview and implications in analytical detection. **Phytochem rev.** v. 10. 2011, p 353-370.

- FERREIRA, S. B.; GONZAGA, D. T. G.; SANTOS, W. C.; ARAÚJO, K. G. L.; FERREIRA, V. F.  $\beta$ -Lapachona: Sua Importância em Química Medicinal e Modificações. **Revista Virtual Química**. v. 2. n.2. 2010. p. 140-160.
- GARCEZ, F.R.; GARCEZ, W.S.; MAHMOUD, T.S.; FIGUEIREDO, P.O. Novos Constituintes Químicos das Cascas do Caule de *Tabebuia Heptaphylla*. **Química Nova** v. 30, n. 8. Campo Grande: Departamento de Biologia, Universidade Federal de Mato Grosso do Sul, 2007.
- HELLWIG, P. Infrared spectroscopic markers of quinones in proteins from the respiratory chain. **Biochimica et Biophysica Acta**. 2015. p. 126-133.
- LEILA, M.; LAGO, A.A.; CICERO, M. S. **Conservação de sementes ipê-roxo**. Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental. v. 16, n. 1. Campinas Grande: UAEEA/UFCG, 2012, p.108 -112.
- LIMA, A.; BAKKER, J. Espectroscopia no infravermelho próximo para monitorização da perfusão tecidual. **Rev. Bras Ter Intensiva**. 2011, p.341-351.
- MILARÉ, A. C. F. H. R. **Atividade leishmanicida e alterações morfológicas em *Leishmania (Leishmania)amazonensis* tratadas com lapachol e  $\beta$ -lapachona**. UEM, Paraná. 2018.
- NAIAZ, K.; KHAN, F.; SHAH, M. A. **Recent Advances in Natural Products Analysis**. Elsevier. 2020. p.752.
- PAVIA, D. L.; LAMPMAN, G. M.; KRIZ, G. S.; VYVYAN, J. R. **Introdução à Espectroscopia**. 4. ed. Cengage Learning. São Paulo, 2013.
- SANTANA, S. S. Síntese, Caracterização, Estudo Eletroquímico e Biológico de Compostos Contendo o Esqueleto 1,4-naftoquinona. Universidade Federal Fluminense. Rio de Janeiro, 2016.
- SILVA, M. N.; FERREIRA, V. F.; SOUZA, M. C. B. V. Um panorama Atual da Química e da Farmacologia de Naftoquinonas, com Ênfase na  $\beta$ -Lapachona e Derivados. **Química Nova** v. 26, n. 3. Universidade Federal Fluminense. Niterói, 2003, p.407-416.
- SILVERSTEIN, R. M.; WEBSTER, F. X. **Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos**. 6 ed. Rio de Janeiro. LTC Editora S.A., 2000.
- SOUZA, E. T.; LOPES, W. A.; ANDRADE, J. B. Fontes, Formação, Reatividade e Determinação de Quinonas na Atmosfera. **Química Nova** v. 39, n. 4.2016. p.486-495.



**SOUZA, P. P. Naftoquinonas Naturais a Partir do Lapachol e Seu Epóxido –  
Ciclização Eletrolítica com Sais de Tálho III e Abertura do Epóxido em Meio  
Básico. UFF Niterói. 2007.**