



ESTUDO TEÓRICO/QUÂNTICO E EXPERIMENTAL DA FORMAÇÃO DE COMPLEXOS DE INCLUSÃO COM CICLODEXTRINA NO ESPECTRO DO INFRAVERMELHO

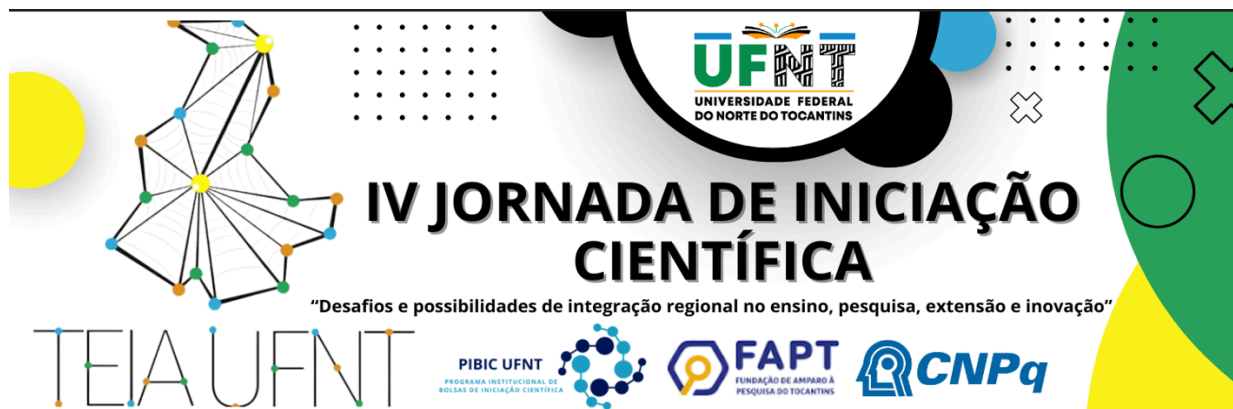
DIAS, Géssica Laurindo¹; OLIVEIRA, Daniel Augusto Barra de²;

RESUMO

O presente estudo teve como objetivo investigar a formação de complexos de inclusão entre o eugenol e a β -ciclodextrina, integrando abordagens experimentais e teóricas para avaliar suas propriedades estruturais e espectroscópicas. O eugenol é um composto fenólico amplamente encontrado no óleo essencial de cravo-da-índia (*Syzygium aromaticum*), reconhecido por suas propriedades analgésicas, anti-inflamatórias, antimicrobianas e antioxidantes. Apesar de suas aplicações farmacêuticas, cosméticas e alimentícias, o eugenol apresenta limitações como baixa solubilidade em água, instabilidade química e citotoxicidade em altas concentrações, fatores que comprometem sua eficácia e restringem seu uso. Nesse contexto, a β -ciclodextrina se destaca como agente encapsulante capaz de melhorar a estabilidade, solubilidade e biodisponibilidade de compostos bioativos por meio da formação de complexos de inclusão. O complexo eugenol/ β -ciclodextrina foi preparado pelo método de mistura física e caracterizado experimentalmente por espectroscopia no infravermelho com transformada de Fourier (FTIR). Foram observados deslocamentos significativos nas bandas de absorção, como o deslocamento da banda O–H em 12 cm^{-1} , indicando a ocorrência de ligações de hidrogênio e a efetiva formação do complexo. O surgimento de bandas na faixa de $1500\text{ a }1700\text{ cm}^{-1}$, ausentes na β -ciclodextrina pura, confirmou a presença do anel aromático do eugenol encapsulado. Os cálculos teóricos baseados na Teoria da Funcional da Densidade (DFT/B3LYP/6-31G) corroboraram os resultados experimentais, revelando estabilidade do complexo e conformação adequada do eugenol no interior da cavidade da β -ciclodextrina. A microscopia de fluorescência demonstrou alterações nas propriedades ópticas do eugenol após o encapsulamento, sugerindo modificações em seu comportamento espectroscópico. Os resultados confirmaram que a complexação promoveu maior estabilidade e

¹ Bolsista do Programa de Iniciação Científica (PIBIC/PIBITI). Universidade Federal do Norte do Tocantins (UFNT), Centro de Ciências Integradas. gessica.laurindo@ufnt.edu.br.

² Professor Doutor do curso de Licenciatura em Química, Universidade Federal do Norte do Tocantins (UFNT), Centro de Ciências Integradas. daniel.oliveira@ufnt.edu.br.



modificação estrutural do eugenol, validando a eficácia da β -ciclodextrina como agente de encapsulamento. A pesquisa contribuiu para o avanço do conhecimento na área de Química e para o desenvolvimento de aplicações práticas em produtos farmacêuticos, cosméticos e alimentícios, além de promover o fortalecimento da integração entre teoria e prática na formação científica.

Palavras-chave: Eugenol. β -Ciclodextrina. Complexos de inclusão. FTIR. DFT.

I. INTRODUÇÃO/JUSTIFICATIVA

O presente estudo investigou a formação de complexos de inclusão entre o eugenol e a β -ciclodextrina, por meio de análises experimentais e teóricas. O eugenol, composto fenólico presente no óleo essencial de cravo-da-índia (*Syzygium aromaticum*), apresenta propriedades analgésicas, anti-inflamatórias, antimicrobianas e antioxidantes, sendo amplamente utilizado nas indústrias farmacêutica, cosmética e alimentícia. Contudo, sua baixa solubilidade em água, instabilidade química e citotoxicidade limitam suas aplicações. A β -ciclodextrina surge como alternativa para encapsular o eugenol, aumentando sua estabilidade, solubilidade e biodisponibilidade. Assim, este trabalho buscou caracterizar o complexo de inclusão por espectroscopia no infravermelho (FTIR) e simulações teóricas por Density Functional Theory (DFT), integrando atividades práticas e computacionais. Inserido na área das Ciências Exatas e da Terra, o estudo contribuiu para o avanço do conhecimento químico e para a formação acadêmica, ao promover a compreensão dos processos de complexação molecular e sua aplicabilidade em sistemas bioativos de interesse farmacêutico e cosmético.

II. BASE TEÓRICA

O eugenol é amplamente reconhecido por suas propriedades terapêuticas, como apontado por Moyer et al. (2002), mas sua baixa solubilidade em água, instabilidade química e citotoxicidade limitam suas aplicações (DE FREITAS et al.,



2021). Para contornar essas restrições, estudos recentes destacam o uso de ciclodextrinas como encapsulantes, especialmente a β -ciclodextrina, cuja cavidade hidrofóbica possibilita a formação de complexos de inclusão estáveis (ABARCA et al., 2016; ZHENG et al., 2020).

A caracterização desses complexos tem sido realizada com espectroscopia no infravermelho (FTIR), método eficaz para identificar interações moleculares (CELEBIOGLU & UYAR, 2017; WANG et al., 2011). Paralelamente, cálculos teóricos baseados na Teoria do Funcional da Densidade (DFT) são empregados para prever estabilidade e configuração estrutural (DE FREITAS et al., 2021). Assim, a revisão de literatura fundamentou a escolha metodológica deste estudo, que integrou análise experimental e modelagem computacional para investigar a inclusão do eugenol em β -ciclodextrina.

III. OBJETIVOS

Objetivo Geral

Investigar a formação de complexos de inclusão entre o eugenol e a β -ciclodextrina, considerando aspectos estruturais, espectroscópicos e teóricos, a fim de compreender seu potencial de aplicação em diferentes áreas.

Objetivos Específicos

- Descrever as propriedades químicas e limitações do eugenol, ressaltando sua relevância para a indústria farmacêutica, cosmética e alimentícia.
- Identificar e analisar, por meio da espectroscopia no infravermelho (FTIR), as interações moleculares resultantes da complexação entre eugenol e β -ciclodextrina.



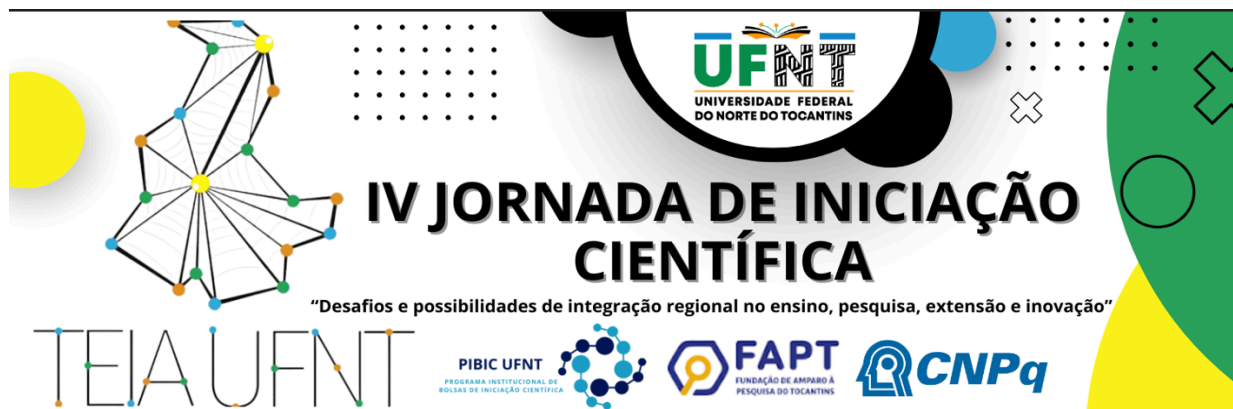
- Realizar estudos teóricos baseados na Teoria do Funcional da Densidade (DFT), descrevendo parâmetros estruturais e espectroscópicos relacionados ao complexo.
- Promover a articulação entre atividades experimentais e computacionais, de modo a reforçar o caráter interdisciplinar da pesquisa.

IV. METODOLOGIA

O estudo foi desenvolvido no município de Araguaína-TO, no campus da Universidade Federal do Norte do Tocantins (UFNT), no período de setembro de 2024 a agosto de 2025.

A caracterização experimental do complexo de inclusão eugenol/ β -ciclodextrina foi realizada por espectroscopia no infravermelho com transformada de Fourier (FTIR). As amostras de eugenol puro, β -ciclodextrina pura e do complexo foram preparadas pelo método de pastilha de brometo de potássio (KBr), na proporção 1:100 (amostra:KBr). As misturas foram homogeneizadas em almofariz de porcelana e prensadas sob alta pressão para obtenção das pastilhas. As análises foram conduzidas em espectrômetro FTIR (Agilent Cary 630 FTIR), no intervalo de 4000 a 400 cm^{-1} , com resolução de 4 cm^{-1} e 64 varreduras por espectro. Os espectros resultantes foram comparados qualitativamente, visando identificar deslocamentos de bandas e alterações de intensidade compatíveis com a formação do complexo de inclusão.

No âmbito teórico, a estrutura da β -ciclodextrina foi obtida do Cambridge Data Bank (CDB), enquanto a molécula de eugenol foi modelada no software GaussView. A simulação da formação do complexo foi conduzida no AutoDock, e as otimizações geométricas, bem como os cálculos vibracionais, foram realizadas no Gaussian 16, empregando a metodologia DFT/B3LYP/6-31G. Os resultados teóricos foram



correlacionados aos dados experimentais de FTIR, possibilitando a interpretação das interações moleculares envolvidas.

V. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A caracterização dos complexos de inclusão entre o eugenol e a β -ciclodextrina foi realizada por espectroscopia no infravermelho (FTIR), cálculos teóricos (DFT) e microscopia de fluorescência. Os resultados experimentais indicaram mudanças significativas nas bandas de absorção quando comparados os espectros do eugenol e da β -ciclodextrina puros com o do complexo formado. O deslocamento da banda O–H de 12 cm^{-1} evidenciou a formação de ligações de hidrogênio entre as moléculas, confirmando a interação direta entre o hóspede (eugenol) e o hospedeiro (β -ciclodextrina). Além disso, o surgimento de bandas na faixa de $1500\text{--}1700\text{ cm}^{-1}$, ausentes na β -ciclodextrina pura, confirmou a presença do anel aromático do eugenol encapsulado.

Os cálculos teóricos de estrutura eletrônica (DFT/B3LYP/6-31G) corroboraram os achados experimentais, apresentando deslocamentos semelhantes nas bandas vibracionais e demonstrando a estabilidade do complexo. As simulações mostraram que a molécula de eugenol se acomoda parcialmente na cavidade da β -ciclodextrina, estabelecendo interações de hidrogênio e forças de van der Waals que mantêm a inclusão estável.

De forma geral, os resultados demonstram que o processo de inclusão foi bem-sucedido, levando à formação de um novo arranjo molecular estável e funcional. A concordância entre dados experimentais e teóricos confirma a eficiência da β -ciclodextrina como agente encapsulante, capaz de aumentar a estabilidade e solubilidade do eugenol, o que amplia suas potenciais aplicações farmacêuticas, cosméticas e alimentícias.



VI. CONCLUSÃO/CONSIDERAÇÕES FINAIS

O estudo confirmou a formação do complexo de inclusão entre o eugenol e a β -ciclodextrina, evidenciada por análises espectroscópicas e teóricas. A complexação proporcionou maior estabilidade e modificações estruturais no eugenol, demonstrando o potencial da β -ciclodextrina como agente encapsulante. A pesquisa contribuiu para o aperfeiçoamento técnico-científico e para a integração entre teoria e prática na formação acadêmica.

VII. REFERÊNCIAS

- ABARCA, R. L.; FERRARI, G.; PINTO, C. Cyclodextrin inclusion complexes: preparation methods, analytical techniques and food applications. *Food Hydrocolloids*, Amsterdam, v. 60, p. 186–198, 2016.
- CELEBIOGLU, A.; UYAR, T. Electrospun nanofibers of cyclodextrins for drug delivery. *Journal of Pharmaceutical Sciences*, Amsterdam, v. 106, n. 3, p. 817–825, 2017.
- DE FREITAS, M. R. et al. Inclusion complexes of eugenol with β -cyclodextrin: characterization and antibacterial activity. *Journal of Molecular Structure*, Amsterdam, v. 1226, p. 129365, 2021.
- HADIAN, Z.; MOGHADDAM, M.; JAFARI, S. M. Preparation and characterization of inclusion complexes of essential oils with β -cyclodextrin by freeze drying method. *Journal of Food Science and Technology*, New Delhi, v. 55, n. 1, p. 1–9, 2018.
- METHODS, M. Essential oils and eugenol: applications and perspectives. *Medicinal Methods*, London, v. 5, p. 45–53, 2021.
- MOYER, M. P.; GHOSH, S.; MATHEWS, H. The pharmacological properties of eugenol. *Phytotherapy Research*, Chichester, v. 16, p. 220–225, 2002.
- SCREMIN, F. R.; SOUZA, M. A.; FONSECA, M. C. Inclusion complex of eugenol with cyclodextrin: physicochemical characterization. *Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry*, Dordrecht, v. 88, p. 67–75, 2017.



WANG, R.; ZHU, X.; LU, Y. Characterization of inclusion complex of eugenol with β -cyclodextrin. *Carbohydrate Polymers*, Oxford, v. 86, p. 272–277, 2011.

ZHENG, L. et al. Encapsulation of essential oils in cyclodextrins and their applications in food. *Food Chemistry*, Amsterdam, v. 319, p. 126646, 2020.

VIII. AGRADECIMENTOS

O presente trabalho foi desenvolvido com o apoio da Fundação de Amparo à Pesquisa do Tocantins (FAPT), por meio do Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica (PIBIC/UFNT). A pesquisa contou com o suporte institucional da Universidade Federal do Norte do Tocantins (UFNT) e com a orientação do professor Daniel Augusto Barra de Oliveira, cuja contribuição científica foi essencial para a execução e consolidação deste estudo.