



Nossas Cientistas: mulheres e ciência no Brasil, ontem e hoje

ESTIMAÇÃO DAS PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DOS COMPOSTOS PRESENTES NO EXTRATO DAS FOLHAS DO CHRYSOBALANUS ICACO

IX Reunião Anual de Iniciação Científica da UFRRJ (RAIC 2021/2022) e III Reunião Anual de Iniciação em Desenvolvimento Tecnológico e Inovação (RAIDTec 2021/2022) - UFRRJ, 0^a edição, de 15/05/2023 a 19/05/2023
ISBN dos Anais: 978-65-5465-041-0

**ISOLDI; Isabella Quintanilha Costa ¹, SILVEIRA; Edison Ribeiro da Motta Silveira ²,
RAMOS; Beatriz Autullo ³, MENDES; Marisa Fernandes ⁴**

RESUMO

A *Chrysobalanus icaco*, popularmente conhecida por abajeru, ocorre comumente ao longo de toda a costa do Brasil. Suas folhas possuem componentes com atividade hipoglicemiante, anti-inflamatória, antitumoral e antioxidante, tornando-o promissor para a indústria de fármacos. Devido ao aumento do interesse em novos compostos, da flora abundante e diversificada do nosso país, que podem ser destinados para a produção de fármacos, torna-se importante o estudo da viabilidade técnica e econômica do processo de extração. O processo de extração com CO₂ supercrítico é um método eficiente e seletivo para a obtenção de extratos bioativos, pois resulta num produto de maior pureza, mais seguro e de maior valor agregado. As propriedades dos compostos químicos puros e suas misturas, são necessárias em quase todos os aspectos de um novo projeto. Esses dados são escassos na literatura, e muitos não são viáveis determinar experimentalmente, por isso é necessário predizê-los. Portanto, o presente estudo tem como objetivo, através do método de contribuição de grupos de Joback, estimar as propriedades físico-químicas dos componentes, para, posteriormente, realizar a simulação da extração dos biocompostos. Realizou-se um levantamento bibliográfico e os compostos selecionados foram: kaempferol, miricetina, queracetina e rutina (flavonoides); lupeol, luponona e ácido pomólico (terpenos); estigmasterol, sitosterol e campesterol (esteróis). Estes foram escolhidos devido à suas atividades medicinais marcantes. O método de contribuição de grupos de Joback prevê propriedades termodinâmicas a partir de sua estrutura molecular. Ou seja, usa uma base de dados estruturais de moléculas químicas já tabeladas, combina as configurações de grupos funcionais e, por fim, calcula as propriedades físico-químicas do composto de interesse com base na soma dos parâmetros do grupo. Os dados estimados foram: temperatura de ebulição (T_b), temperatura de fusão (T_f), temperatura crítica (T_c), pressão crítica (P_c) e volume crítico (V_c).

¹ UFRRJ, isabellaisoldi@ufrj.br

² UFRRJ, e.ribeiro5328@gmail.com

³ UFRRJ, beatriz_autullo@ufrj.br

⁴ UFRRJ, marisamendes40@gmail.com

Para o lupeol obtivemos, na sequência acima, os seguintes valores: 947,56 K; 400,58 K; 1162,01 K; 9,09 bar e 1524,5 cm³/mol. Para a luponona: 909,69 K; 613,25 K; 1114,05 K; 8,89 bar e 1517,5 cm³/mol. Para o ácido pomólico: 1169,66 K; 751,26 K; 1476,67 K; 9,82 bar e 1540,5 cm³/mol. Para o 7-O-metil-kaempferol: 921,43 K; 651,81 K; 1157,85 K; 40,62 bar e 608,5 cm³/mol. Para a miricetina 3-O-glucuronídeo: 1683,42 K; 1367,05 K; 2279,63 K; 70,97 bar e 882,5 cm³/mol. Para a miricetina 3-O-ramnosídeo: 1537,91 K; 1206,45 K; 1995,67 K; 61,42 bar e 858,5 cm³/mol. Para a miricetina 3-O-rutinosídeo: 1992,97 K; 1458,73 K; 4067,57 K; 45,53 bar e 1239,5 cm³/mol. Para a quercetina 3-O-ramnosídeo: 1457,29 K; 1094,73 K; 1861,98 K; 49,25 bar e 892,5 cm³/mol. Para a rutina: 1905,48 K; 1321,13 K; 3620,62 K; 37,73 bar e 1279,5 cm³/mol. Para o b-sitosterol: 943,56 K; 473,67 K; 1159,21 K; 8,66 bar e 1517,5 cm³/mol. Para o estigmasterol: 947,72 K; 468,59 K; 1162,70 K; 8,93 bar e 1497,5 cm³/mol. E, por último, para o campesterol: 920,68 K; 462,4 K; 1128,81 K; 9,17 bar e 1461,5 cm³/mol. Os resultados encontrados neste trabalho viabilizarão o cálculo do equilíbrio de fases, a simulação do processo de extração e o estudo da viabilidade econômica da implementação em escala industrial.

PALAVRAS-CHAVE: método de Joback, fitofármacos, propriedades termo-físicas