

RESUMO - BIOMATERIAIS

ANÁLISE ESPECTROSCÓPICA E COMPORTAMENTO DE IONIZAÇÃO DA 4-METILESCULETINA EM DIFERENTES SOLVENTES

Isabela Batista De Castro Nunes (isabela.batista@unesp.br)

Melissa Nishida Hirano (melissa.hirano@unesp.br)

Giovanna Eller Silva Sousa (giovanna.eller@unesp.br)

Marina Andrade D'angelo (marina.angelo@unesp.br)

Sabrina Alessio Camacho (sabrina.alessio@gmail.com)

As cumarinas são compostos fenólicos naturais com reconhecidas atividades antioxidantes, antiinflamatórias e antitumorais. Entre elas, a 4-metilesculetina (4ME) tem despertado interesse por seu potencial farmacológico. Técnicas espectroscópicas como UV-Vis e FTIR são fundamentais para a caracterização da 4ME, permitindo analisar e correlacionar características estruturais com suas atividades em sistemas biológicos. A 4ME foi caracterizada tanto em solução (DMSO, água ultrapura e meio DMEM F12) quanto em pó. No UV-Vis, foram feitas diluições seriadas (de 2,5 μM a 25 μM), para leituras de 200 nm a 400 nm. Já no FTIR, utilizou-se o ATR para as amostras em pó, enquanto as soluções foram depositadas sobre substratos de germânio por drop-casting e analisadas por transmitância.

O espectro de absorção no UV-Vis evidenciou um efeito solvatocrômico. Em DMSO, a 4ME apresentou máximo de absorção em 350 nm (forma neutra, baixo coeficiente de absorvidade). Em água ultrapura, observou-se um deslocamento para 342,7 nm, e em DMEM F12 ocorreu um deslocamento para 357,7 nm, indicando a predominância da forma aniônica (A⁻) decorrente da ionização do grupo hidroxila. A análise por FTIR indicou que a 4ME em pó apresenta estado neutro, sem o pico aniônico em 1565 cm⁻¹. Em DMSO, manteve-se neutra, com deslocamento de νOH para 3283 cm⁻¹ e νC=O para 1667 cm⁻¹, evidenciando forte solvatação por ligações de hidrogênio. Em água ultrapura, o pico em 1565 cm⁻¹ confirmou a forma aniônica (A⁻) e maior conjugação eletrônica. Em DMEM F12, o espectro foi dominado por bandas de OH e Amida, características da composição do meio. Esses resultados indicam que o estado de ionização da 4ME é fortemente dependente do ambiente químico, o que pode influenciar sua ação biológica.

Palavras-chave: 4-metilesculetina; cumarina; ftir; uv-vis; ionização.