



Estudo de estruturas biogênicas de pigmentos têxteis
com atividades biológicas

Projeto submetido ao PIBIC/UFABC

Edital 04/2022

Santo André
Junho de 2022

SUMÁRIO

Resumo.....	2
I. Introdução e contextualização.....	3
II. Objetivos de pesquisa.....	4
III. Metodologia.....	5
IV. Viabilidade da Execução.....	8
V. Cronograma.....	8
VI. Referências.....	9

RESUMO

No presente projeto, a aluna será apresentada, por meio de ferramentas químico-computacionais e dados, às áreas de química e física quântica, usando como temática o estudo de pirróis presentes em micro-organismos marinhos. Estes compostos podem ser usados como agentes pigmentantes em indústrias têxteis de forma sustentável, além de promoverem vantagens biológicas com seu uso, como atividades anti-cancerígenas. Nesse sentido, neste projeto, serão determinadas propriedades importantes para o entendimento do espectro de absorção e das propriedades de interação com diferentes substratos.

PALAVRAS-CHAVE: Microorganismos marinhos; espectros de absorção; pirróis; corantes; química verde.

TEMA DE ATUAÇÃO: Química e física quântica; química computacional.

I-INTRODUÇÃO E CONTEXTUALIZAÇÃO

A química computacional tornou-se um meio facilitador do estudo das propriedades físicas e químicas das substâncias, tendo em vista que muitas vezes a molécula a ser estudada pode ser de difícil obtenção em laboratórios experimentais, por exemplo. Assim, a modelagem molecular resolve esse problema, pois proporciona o estudo e otimização das moléculas de interesse.

Inicialmente, fazendo uso dessa abordagem, foi possível e viável estudar as características moleculares dos pirróis; seus espectros de absorção, sua geometria molecular e dentre outras propriedades, que serão especificadas à frente.

Antes dos meados de 1850, todos os corantes usados para tingir tecidos eram provenientes de pigmentos naturais, como o de cor púrpura que era obtido de um molusco marinho. Mais tarde, se tornou necessário descobrir um modo de otimizar a tintura de tecidos, visto que a demanda cresceu gradativamente. A solução para esse problema foi o desenvolvimento de corantes via química sintética.

É mister citar que, conceitualmente, há uma diferença entre “corantes” e “pigmentos”. Segundo *the Society of Dyers and Colourists* (a Sociedade de Tingidores e Coloristas), corantes são moléculas solúveis em água que perdem temporariamente o arranjo cristalino no processo de aplicação, e pigmentos são moléculas insolúveis em água e assim, uma estrutura de partículas é retida em seu processo de coloração. [1]

Nos dias atuais, há uma produção de mais de 1 milhão de toneladas de corantes sintéticos por ano [1]. No entanto, quanto mais essa indústria se desenvolveu, a poluição dos ecossistemas, principalmente o marinho, também cresceu. No Brasil, esta possui grande valor socioeconômico, com mais de 1,5 milhões de empregados diretos, a segunda maior empregadora. Além disso, o país é o quinto maior produtor mundial de têxteis [2]. Em contrapartida, é o segmento industrial com maior consumo de água, especificamente nas etapas de tinturaria e acabamento, gerando de 50 a 100 litros de efluente contaminado

por quilo de tecido tingido. O descarte dos efluentes têxteis nos ambientes aquáticos causam, o esgotamento do oxigênio dissolvido, desequilibrando o ecossistema, além de impedir a penetração da luz solar, alterando assim a atividade fotossintética, e deixando o ambiente extremamente tóxico aos seres vivos desse habitat [3]. Nesse contexto, é possível afirmar que as indústrias brasileiras apresentam sua irresponsabilidade ambiental com os descartes de efluentes, visto que quase toda a carga de corantes é descartada em ambientes aquáticos. Observa-se também que essas empresas investem pouco nesse tratamento [3].

Tendo em vista os fatos supracitados, é de extrema importância uma solução ao problema acima, de forma tal que, nenhum ecossistema seja afetado por atividades antrópicas de tingimento ou uso de corantes sintéticos. É neste sentido que corantes e pigmentos, obtidos de maneira mais sustentável, têm sido propostos. Compostos biogênicos, que são aqueles produzidos pela ação de organismos vivos, são inspiração para novos compostos que tendem a ser também biodegradáveis. Assim, conhecer melhor a estrutura eletrônica e demais propriedades é muito importante para propor novos compostos bioinspirados.

Dentre os vários tipos de corantes e pigmentos biogênicos, neste projeto é proposto o estudo de um composto orgânico abundante em micro-organismos marinhos, como *Serratia marcescens*, a prodigiosina (Figura 1).

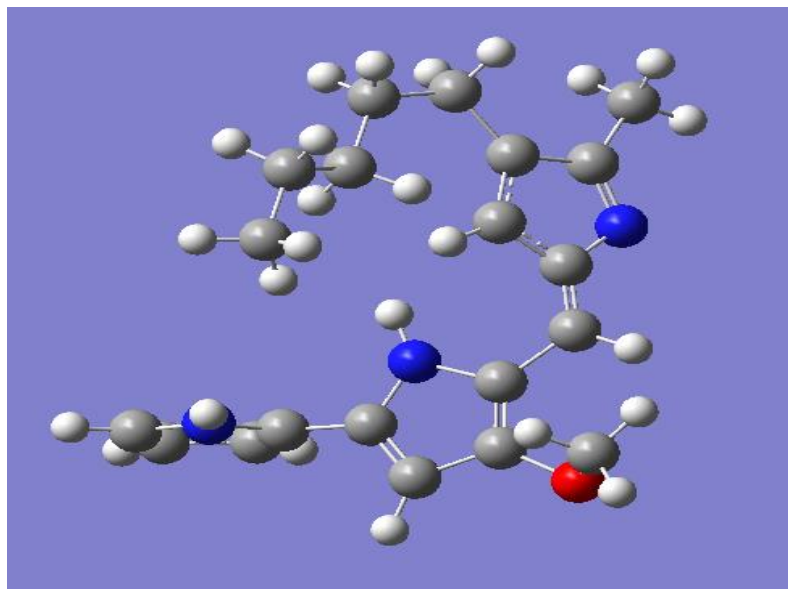


Figura 1. Estrutura molecular da (tripirrol-prodigiosina-1).

Fonte: própria autora.

A estrutura presente na Figura 1, possui 3 pirróis (compostos orgânicos heterocíclicos aromáticos, com anéis de 4 carbonos e nitrogênio presente em cada anel) e, ao ser isolado da bactéria, possui uma coloração avermelhada. É visto também que a molécula estudada possui uma série de atividades biológicas: antibacterianas, antifúngicas, efeitos antimalária, antibióticas, imunossupressoras, anti-diabéticas e, por fim, anti-cancerígenas. Não somente isso, a substância pode ser usada com propriedades de tingimento, tais como corante comestível, tecidos, cosméticos, medicamentos e polímeros do tipo poliolefinas [4].

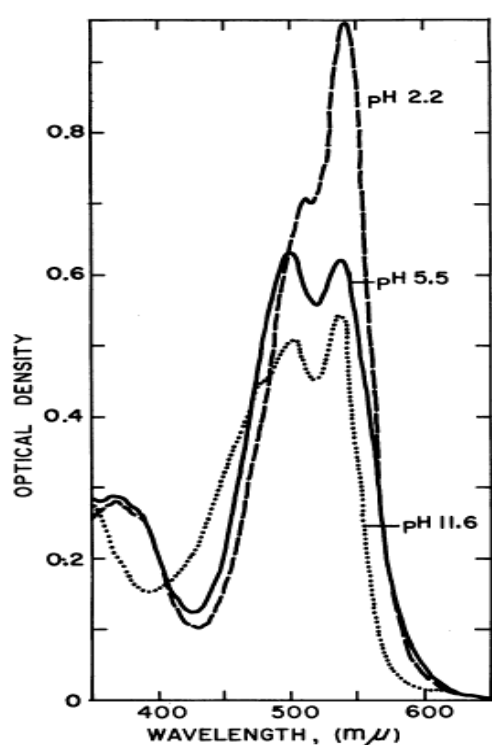


Figura 2. Espectro eletrônico de absorção da tripirrol-prodigiosina-1. [5]

Analisando seu espectro de absorção, descrito graficamente a seguir (Figura 2), é possível ver que a cor varia em função do meio. A densidade ótica aumenta com a redução do valor do pH em que a bactéria se encontra. Em meio ácido, pH = 2.2, o máximo se encontra em torno de 550 nm. Ao diminuir a acidez do meio, essa banda diminui e a banda em torno de 500 nm se torna mais evidente. Assim, o pigmento, normalmente alaranjado, pode obter uma coloração rosa avermelhada se disposto a um ambiente acidificado. [5]

Entender esse comportamento é importante para apresentar a aluna como o espectro eletrônico de absorção depende da estrutura molecular e passar então a estudar outras estruturas moleculares e sua relação com o espectro e outras propriedades moleculares, como momento de dipolo, cargas atômicas, formato e energias dos orbitais moleculares, dentre outros.

II - OBJETIVOS DE PESQUISA

Como objetivo principal, estudar corantes biogênicos, bem como suas interações intra e intermoleculares, e derivados. Como objetivos específicos:

- Introdução à química computacional, estudando as metodologias para otimização, frequência, obtenção de espectros de absorção, dentre outras propriedades moleculares;
- Fomento ao pensamento científico crítico mediante as transformações globais, a fim de saber escolher os objetos de estudo dentro de um contexto de Ciência, Tecnologia e Sociedade, especialmente no que tange a sustentabilidade;
- Experiência de trabalho em grupo com colegas e especialistas na área de estudos computacional, além de influenciar positivamente em disciplinas estudadas na Universidade.

III - METODOLOGIA

Como citado anteriormente, serão utilizados softwares especializados em química computacional para simulação de moléculas, estudando suas propriedades físico-químicas. Os softwares Avogadro e Gaussview serão utilizados para a construção das moléculas, e os softwares Gaussian e Orca serão utilizados para a otimização de geometria e cálculo de frequências, no âmbito da Teoria do Funcional da Densidade (DFT) com o funcional B3LYP e a base 6-31G(d). Serão calculados os dipolos e cargas atômicas derivadas do potencial eletrostático (ChelpG), bem como avaliados os orbitais moleculares de fronteira. O espectro de absorção será obtido com a teoria do funcional da densidade dependente do tempo (TDDFT) no mesmo nível de teoria.

A aluna iniciou o estudo para os corantes a seguir (Figuras 3 e 4).

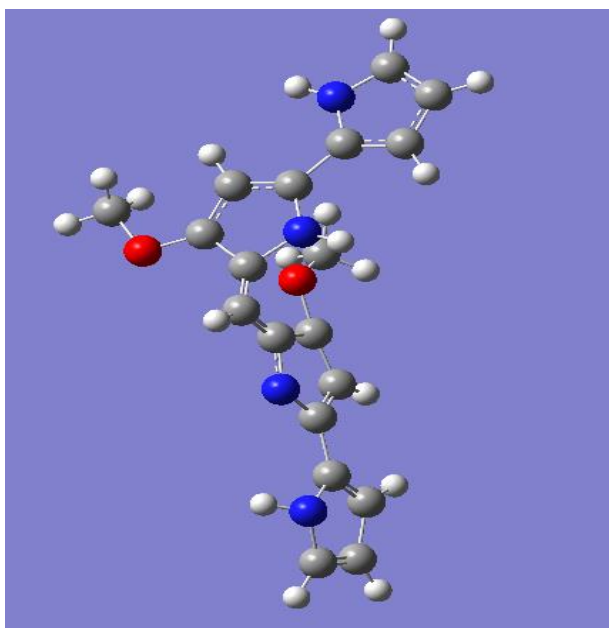


Figura 3- Estrutura otimizada do Tetrapirrol- Prodigiosina

O composto prodigiosin tetrapirrol possui 43 átomos e 176 elétrons, é neutro e singlete. Ele possui 4 pirróis em sua composição e, pretende ser mais estudado pela graduanda ao decorrer do projeto, visto que a molécula foi raramente estudada por outros pesquisadores.

O tripirrol-nonil prodigiosin, com 59 átomos, 204 elétrons e, assim como a anterior, um composto neutro e singlete. Pesquisas brasileiras indicam que o composto é encontrado no Brasil na actinobactéria *Actinomadura sp* e possui, assim como o prodigiosin, propriedades anticancerígenas. Pela sua nomenclatura, vê-se que o composto se relaciona como uma unidade de hidrocarbonetos.

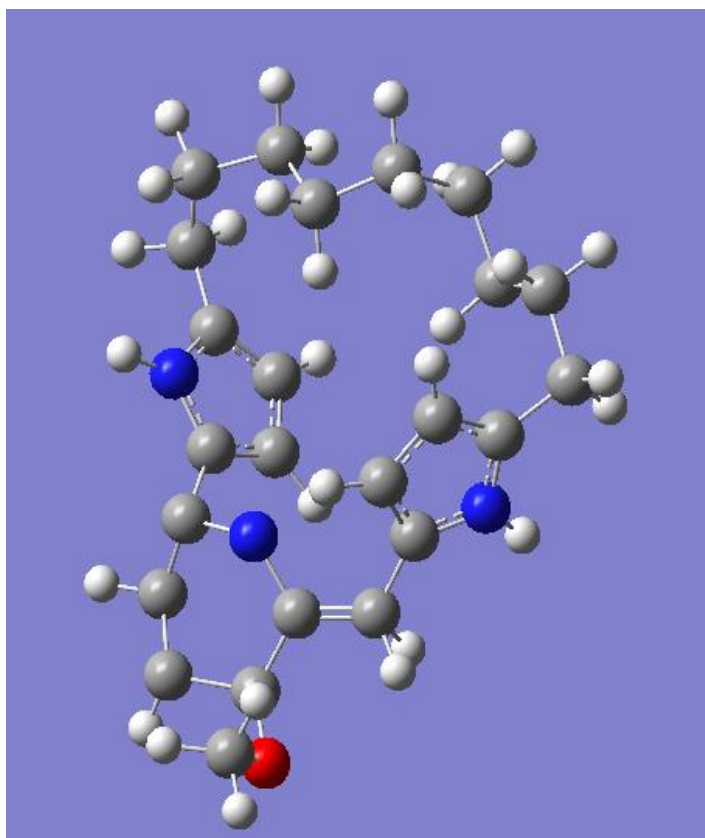


Figura 4- Estrutura otimizada do tripirrol-nonilprodigiosin

A aluna pretende aprofundar as pesquisas dessas substâncias, que foram pouco estudadas por outros cientistas e pesquisadores, especialmente computacionalmente.

IV - CRONOGRAMA DE ATIVIDADES E VIABILIDADE

Atividades programadas	Quadrimestre		
	1	2	3
1. Pesquisa bibliográfica	X	X	X
2. Estudos sobre os métodos e metodologias empregados na área de química computacional	X	X	X
3. Organização de dados experimentais encontrados na literatura e levantamento de novas moléculas para os estudos ocmputacionais	X	X	
4. Realização dos cálculos de otimização, frequência, espectro de absorção e demais propriedades para as moléculas selecionadas	X	X	X
5. Redação de relatórios e resumo para participação de evento		X	X

Ao longo do projeto, as atividades serão realizadas presencialmente no laboratório L208, no qual o grupo mantém a infraestrutura adequada, com computadores e os softwares necessários para a pesquisa. Além disso, a aluna poderá utilizar o sistema multiusuário de computação de alto desempenho.

Os encontros com a orientadora serão realizados semanalmente com conteúdos diversificados, desde o estudo das bases da mecânica quântica (em complemento às disciplinas do Bacharelado em Ciência e Tecnologia), métodos e levantamentos bibliográficos, além de aprender a utilizar os softwares e discussão de resultados.

V-REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] FRIED, R., Oprea, I., FLECK, K., RUDROFF, F. **Biogenic colourants in the textile industry – a promising and sustainable alternative to synthetic dyes.** *Green Chemistry*. 2022, 24, 13-35.
- [2] ABIT – Associação Brasileira da Indústria Têxtil. Disponível em: <<http://www.abit.org.br>>. Acesso em 08 nov. 2016. *Apud*: ALMEIDA, ÉJR, DILARRI, G, CORSO, CR. **A indústria têxtil no Brasil: Uma revisão dos seus impactos ambientais e possíveis tratamentos para os seus efluentes.** 2016
- [3] ALMEIDA, ÉJR, DILARRI, G, CORSO, CR. **A indústria têxtil no Brasil: Uma revisão dos seus impactos ambientais e possíveis tratamentos para os seus efluentes.** 2016. Disponível em: <https://conexaoagua.mpf.mp.br/arquivos/artigos-cientificos/2016/01-a-industria-textil-no-brasil-uma-revisao-dos-seus-impactos-ambientais-e-possiveis-tratamentos-para-os-seus-efluentes.pdf>.
- [4] ZHAO, Y., CHENG, Q., SHEN, Z., FAN, B., XU, Y., CAO, Y., PENG, F., ZHAO, J., & XUE, B. **Structure of prodigiosin from *serratia marcescens* njzt-1 and its cytotoxicity on tsc2-null cells.** *Food Science and Technology*, 41, 189-196, 2021. <https://doi.org/10.1590/fst.35719>
- [5] MONK, GW. **Spectral absorption of prodigiosin in intact cells.** *J Bacteriol.* 74(1): 71–74, 1957. <https://doi.org/10.1128/jb.74.1.71-74.1957>.
- [6] AMARO, E. T., GUIMARÃES L., FERREIRA, EG, TORRES, MCM, SILVA, AB, BRANCO, PC, OLIVEIRA, FAZ, SILVA, GGZ, WILKE, DV, SILVEIRA, ER, PESSOA, ODL, JIMENEZ, PC, COSTA-LOTUFO, LV. **Bioprospecting Anticancer Compounds from the Marine-Derived Actinobacteria *Actinomadura* sp. Collected at the Saint Peter and Saint Paul Archipelago (Brazil).** 28 (3), 465-474, 2017.