



Estudo teórico/experimental de RMN-H e C de Quitina e Quitosanas.

Wander Luiz Alves Amorim, Bethania Gonçalves de Paiva Amorim, Rubén Jesus Sánchez Rodrigues

A quitina, o segundo polímero natural mais importante do mundo, e a Quitina, seu derivado N-desacetilado, foram identificados como biopolímeros versáteis para uma ampla gama de aplicações na medicina, na agricultura e na indústria de alimentos. Duas das principais razões para isso são, em primeiro lugar, as propriedades químicas, físico-químicas e biológicas únicas da quitina e quitosana e, em segundo lugar, o fornecimento ilimitado de matérias-primas para a sua produção. Estes polímeros exibem propriedades físico-químicas muito diferentes dependendo da fonte de quitina e das condições de produção de quitosana. A presença de grupos funcionais reativos, bem como a natureza polissacarídica destes biopolímeros, lhes permite sofrer diversas modificações químicas. Uma caracterização química e físico-química completa da quitina, quitosana e seus derivados não é possível sem o uso de técnicas espectroscópicas. Aqui faremos um estudo de predição de RMN-H e C e comparando a dados experimentais. A espectroscopia de RMN é uma das técnicas mais poderosas para o estudo estrutural e físico-químico de compostos orgânicos, tanto de moléculas pequenas quanto de polímeros. Parece ser altamente adequado para estudar quitina e quitosana. No entanto, a solubilidade destes compostos apresenta um problema grave. A quitina com uma maior DA é praticamente insolúvel em todos os solventes e misturas diferentes, enquanto a quitosana é solúvel em solução aquosa ácida. A sua solubilidade depende do grau de N-acetilação, do grau de polimerização, do grau de cristalinidade, da distribuição de GlcNAc e GlcN ao longo da cadeia polimérica, da força iônica do solvente e do pH e da concentração de quitosana na solução. Este estudo da relação teórico/experimental irá avaliar os deslocamentos dos grupamentos de Hidrogênios, e consequentemente seus grupamentos de átomos de Carbono, assim podendo servir de base para futuros trabalhos.

Palavras-chave: RMN-H e C, Estudo Teórico/Experimental, Quitina/Quitosana

Instituição de fomento: FAPERJ