



Evento	Salão UFRGS 2014: SIC - XXVI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2014
Local	Porto Alegre
Título	Caracterização do sistema formado pelo surfactante natural Quillaja Saponaria por espalhamento de raios x a baixos ângulos (SAXS)
Autor	PAOLA DORNEL DA SILVA
Orientador	CILAINE VERONICA TEIXEIRA

Surfactantes são estruturas anfifílicas que se agregam quando em solução aquosa, formando micelas, que maximizam o contato da parte hidrofílica com a água e minimizam o da parte hidrofóbica. Variando-se o surfactante usado, sua concentração e as condições do solvente obtém-se um rico polimorfismo de estruturas que têm sido usadas em diversas aplicações na indústria farmacêutica, de cosméticos, alimentícia, e outras áreas tecnológicas. A eficácia de suas aplicações depende da estrutura formada e de sua estabilidade. Compostos naturais são fortes candidatos para aplicação nessas áreas. O foco deste trabalho é o estudo do surfactante natural Quillaja Saponina (QS), obtido de uma árvore do Chile. A Quillaja é formada por um centro de triterpeno (apolar) com duas cadeias de açúcares (polar) ao seu redor. O objetivo é caracterizar sua estrutura para diferentes concentrações, em solução, utilizando-se a técnica de espalhamento de raios X a baixos ângulos (SAXS). A intensidade de raios X espalhada é dada pelo fator de forma, que depende do tamanho e da forma das micelas, e pelo fator de estrutura, que depende da interação entre partículas. O ajuste da curva de intensidade calculada às curvas experimentais fornece informação sobre o tamanho, a forma, a distribuição de densidade eletrônica, distância aproximada entre micelas (quando é o caso) e da carga das micelas. A análise de dados foi feita com o programa Genfit (Generalized Fitting), desenvolvido pelo Prof. Francesco Spinozzi, da Università Politécnica delle Marche. O programa permite a modelagem conjunta de diversas curvas, fazendo um ajuste generalizado com parâmetros com cálculo de um único χ^2 .

As amostras estudadas têm concentração de 2, 3, 5, 8 e 12% em peso de QS em água a pH 2. A análise foi feita considerando-se a forma de elipsoides e interação via potencial de Coulomb blindado. A forma de bicelas também foi utilizada para verificação, porém não forneceu resultados satisfatórios, sendo o elipsoide a forma mais adequada para descrever as micelas. Os resultados indicam que há uma mudança na forma da micela com o aumento da concentração. Para as concentrações de 2 a 5%, as micelas apresentam formato de elipsoide com três eixos distintos. Entretanto para 8 e 12% os resultados indicam que a micela se torna esférica. A diminuição da razão axial das micelas com o aumento do número de moléculas em solução está de acordo com trabalho publicado recentemente pelo grupo.¹

A densidade eletrônica da camada polar é um pouco maior que a do solvente (densidade eletrônica do solvente foi fixada em $0,33 \text{ elétrons}/\text{Å}^3$), enquanto que a densidade eletrônica do interior apolar é consideravelmente maior, o que também concorda com trabalhos publicados.²

Vimos também que os resultados não dependem da carga micelar, o que indica que as micelas são neutras, resultado que foi confirmado por medidas de potencial zeta.

Os resultados obtidos representam um passo para a compreensão da interação das saponinas com outras moléculas como o colesterol, ou lipídios.

¹ Pedebos, C., Pol-Fachin, L., Pons, R., Teixeira, C.V., Verli, H., *Molecules*, 2014, 19, 3744-3760.

² Mascarenhas, Y. P., & Cota, A. B. *Acta Cyst.* 1990, C46, 326-327.