

**Produção de álcool em gel 70% com diferentes precursores poliméricos****Production of alcohol in gel 70% with different polymeric precursors**

DOI:10.34117/bjdv6n11-147

Recebimento dos originais: 09/10/2020

Aceitação para publicação: 09/11/2020

**Luciana Macedo Brito**Doutora em Ciências, em Ciência e Tecnologia de Polímeros  
Universidade Federal Rural do Rio de JaneiroDepartamento de Ciências Farmacêuticas, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Rodovia  
BR 465 - Km 7, Campus Universitário - Seropédica, Rio de Janeiro – RJ, CEP 23851-970  
e-mail: lufarmufrj@hotmail.com**Vinicius de Oliveira Aguiar**

Doutor em Ciências, em Ciência e Tecnologia de Polímeros

Instituto de Macromoléculas Professora Eloisa Mano da Universidade Federal do Rio de Janeiro  
Av. Horácio Macedo, 2030, BL J, Centro de Tecnologia, Ilha do Fundão, Rio de Janeiro, RJ, Brasil,  
CEP 21941-598  
e-mail: nviny\_815@hotmail.com**Paulo Sérgio Rangel Cruz da Silva**

Doutor em Ciências, em Ciência e Tecnologia de Polímeros

Instituto de Macromoléculas Professora Eloisa Mano da Universidade Federal do Rio de Janeiro  
Av. Horácio Macedo, 2030, BL J, Centro de Tecnologia, Ilha do Fundão, Rio de Janeiro, RJ, Brasil,  
CEP 21941-598  
e-mail: rangel@ima.ufj.br**Bruno de Paula Amantes**

Doutor em Ciências, em Ciência e Tecnologia de Polímeros

Instituto de Macromoléculas Professora Eloisa Mano da Universidade Federal do Rio de Janeiro,  
Av. Horácio Macedo, 2030, BL J, Centro de Tecnologia, Ilha do Fundão, Rio de Janeiro, RJ, Brasil,  
CEP 21941-598  
e-mail: brunoamantes@ima.ufjr.br**Elton Jorge da Rocha Rodrigues**

Doutor em Ciências, em Ciência e Tecnologia de Polímeros

Instituto de Macromoléculas Professora Eloisa Mano da Universidade Federal do Rio de Janeiro  
Av. Horácio Macedo, 2030, BL J, Centro de Tecnologia, Ilha do Fundão, Rio de Janeiro, RJ, Brasil,  
CEP 21941-598  
e-mail: eltonrodrigues@ima.ufjr.br**Pedro Paulo Merat**

Doutor em Ciências, em Ciência e Tecnologia de Polímeros

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro  
Av. República do Paraguai, 120- Vila Sarapui, Duque de Caxias-RJ, CEP 25050-10  
e-mail: pmerat2@gmail.com

**Maria Inês Bruno Tavares**

Doutora em Ciências, em Ciência e Tecnologia de Polímeros

Instituto de Macromoléculas Professora Eloisa Mano da Universidade Federal do Rio de Janeiro  
Av. Horácio Macedo, 2030, BL J, Centro de Tecnologia, Ilha do Fundão, Rio de Janeiro, RJ, Brasil,  
CEP 21941-598  
e-mail: mibt@ima.ufrj.br

## RESUMO

O presente estudo propõe a utilização de polímeros alternativos para a obtenção de álcool em gel 70% como ferramenta de higiene no combate ao Covid-19. Além da carboximetilcelulose, foram utilizados polímeros comerciais, descritos como derivados da celulose, Carbomex e Maxcarb, os quais apresentam propriedades gelificantes em potencial em diversas áreas. As formulações foram obtidas utilizando diferentes concentrações dos agentes gelificantes com água, glicerina e etanol. Os materiais iniciais, bem como as formulações obtidas, foram caracterizados por diferentes técnicas, incluindo Difração de Raios X, Relaxometria, Análise termogravimétrica.

Os resultados das análises de Raios X indicaram uma maior cristalinidade do material obtido com Maxcarb e Carbomex quando comparados à Carboximetilcelulose. A análise termogravimétrica dos materiais indicou que o Maxcarb possui o maior valor de temperatura de degradação. Com as análises de relaxometria foi possível obter os tempos de relaxação dos materiais em solução e nos estado sólido. A Carboximetilcelulose apresentou menor valor de relaxação spin-rede quando comparado ao Maxcarb e Carbomex que apresentaram menores valores.

**Palavras-chave:** Covid-19, CMC, Álcool Gel

## ABSTRACT

The present study proposes the use of alternative polymers to obtain 70% gel alcohol as a hygiene tool to combat Covid-19. In addition to carboxymethylcellulose, commercial polymers were used, described as cellulose derivatives, Carbomex and Maxcarb, which have potential gelling properties in several areas. The formulations were obtained using different concentrations of the gelling agents with water, glycerin and ethanol. The initial materials, as well as the formulations obtained, were characterized by different techniques, including X-Ray Diffraction, Relaxometry, Thermogravimetric analysis.

The results of the X-ray analyzes indicated a greater crystallinity of the material obtained with Maxcarb and Carbomex when compared to Carboxymethylcellulose. The thermogravimetric analysis of the materials indicated that Maxcarb has the highest degradation temperature value. With the analysis of relaxometry it was possible to obtain the relaxation times of the materials in solution and in the solid state. Carboxymethylcellulose showed a lower spin-net relaxation value when compared to Maxcarb and Carbomex, which presented lower values.

**Keywords:** Covid-19, CMC, Alcohol gel

## 1 INTRODUÇÃO

A higienização das mãos é reconhecida, mundialmente, como uma medida primária muito importante no controle de infecções relacionadas à assistência à saúde. Por este motivo, tem sido considerada como um dos pilares da prevenção e controle de infecções (Costa et al., 2018).

Em razão do avanço e do surgimento de novas e devastadoras doenças, tornou-se necessário que em todos os estabelecimentos públicos e privados, como pontos comerciais, estabelecimentos de

serviços de saúde e de tráfegos (como aeroportos e rodoviárias), esteja disponível o álcool em gel, que é antisséptico e que se mostra bastante eficiente no combate de diversas doenças. A Resolução RDC nº 42, de 25 de outubro de 2010 dispõe sobre a obrigatoriedade de disponibilização de preparação alcoólica para fricção antisséptica das mãos, pelos serviços de saúde do país (Saraiva, 2020; Brasil, 2010).

A seleção de um composto antisséptico é feita levando-se em consideração a sua segurança e eficiência. Entre os principais antissépticos utilizados para a higienização das mãos pode-se destacar: álcoois, clorexidina e compostos de iodo. Embora os álcoois apresentem a característica de ressecar a superfície da pele, devido à remoção dos lipídios, eles apresentam baixa toxicidade na pele e apresentam excelente atividade contra uma série de microorganismos (Toigo, 2020; Santos, 2002).

O álcool na concentração de 70% se apresenta com melhor agente degermante, atingindo as bactérias gram-positivas e gram-negativas, os fungos, os vírus e não apresenta nenhum efeito residual. Nesta concentração, possui ação sobre desnaturação de proteínas e de estruturas lipídicas da membrana celular, levando à destruição do microrganismo (lise celular). O álcool tem apresentado resultados satisfatórios na antisepsia das mãos e quando apresentado na solução em gel em associação com glicerina é capaz de diminuir o ressecamento da pele causado pelo álcool. A maior eficácia do álcool 70%, em comparação a apresentações com maior concentração alcoólica (92%, 99% ou anidro) acontece devido à maior quantidade de água, o que reduz a velocidade de evaporação do álcool. Por apresentar uma menor velocidade de evaporação, faz com que o álcool permaneça mais tempo sobre a pele, aumentando de forma significativa seu tempo de ação (Magalhães, 2020).

Os carbômeros são agentes gelificantes/espessantes tradicionalmente utilizados na fabricação do álcool em gel e sua falta representa uma dificuldade técnica inicial para realizá-la. Entretanto, existem alternativas aos carbômeros que podem ser usadas como espessante para fabricar o álcool em gel e suprir a demanda de mercado.

Diversos polímeros e copolímeros têm sido relatados como alternativas na produção de álcool em gel 70%, porém muitos deles apresentam desvantagens como baixas propriedades reológicas, características organolépticas diferenciadas em relação ao carbopol e muitas vezes não suportam a quantidade de álcool necessária para que a solução final seja 70%.

Dentre os polímeros derivados da celulose podemos citar como exemplos: a carboximetilcelulose (CMC) e outros derivados com os nomes comerciais Carbomex e Maxcarb 940/980.

A CMC é um pó inodoro de sabor característico e coloração branca a amarelada. Derivada da celulose é utilizada na indústria de alimentos como espessante, estabilizante, umectante e gelificante,

e para conferir volume e corpo e reter água. Disponível na forma sódica (sal de sódio), como carboximetilcelulose de sódio (Guglielmi et al., 2008).

O Carbomex e Maxcarb são polímeros comerciais que vêm sendo utilizados como substituintes ao Carbopol. O Maxcarb apresenta-se como pó esbranquiçado, inodoro e tem sido descrito como aditivo reológico formulado a base de éter metílico da celulose, indicado para formulações especiais, como na formulação de gel tópico, sem a necessidade do uso de neutralizante.

Visto a necessidade do mercado em padronizar formulações alternativas ao carbopol, o presente projeto teve como objetivo principal o desenvolvimento e caracterização de uma formulação sanitizante para as mãos utilizando diferentes polímeros e utilização como medida preventiva na transmissão do Covid-19.

## **2 MATERIAIS E MÉTODOS**

### **2.1 DESENVOLVIMENTO DAS FORMULAÇÕES**

O modo de preparação variou de acordo com o gelificante utilizado a ser usado. Cada gelificante exige um procedimento específico para hidratação, e pode ser adicionado na água ou na glicerina, ou mesmo na fase hidroalcolica total, sob agitação que pode variar de intensidade na faixa de 500 a 2000 rpm. O preparo de todas as formulações foi baseado nas recomendações da Farmacopeia Brasileira (ANVISA, 2010). A glicerina foi utilizada em todas as formulações como agente intermediário para facilitar a incorporação da água e sobretudo, diminuir problemas de ressecamento nas mãos. Após inchamento, todas as formulações foram acrescidas de etanol 96° GL para se obter a formulação final de 77°GL, como descrito na Farmacopeia Brasileira. A alcoometria foi realizada com alcoômetro Gay Lussac à temperatura ambiente em todas as formulações, bem como a medição da concentração inicial do etanol utilizado. As medidas de pH foram realizadas com medidor de pH digital.

### **2.2 ANÁLISE DE RAIOS X (DRX)**

O difratômetro de raios X Rigaku Mini Flex trabalhou com uma diferença de potencial no tubo de 30 kV e corrente elétrica de 15 mA. A varredura foi realizada na faixa de  $2\theta$  de 2° a 80°, com velocidade do goniômetro de 0,05 °/min. A radiação utilizada foi a de  $\text{CuK}\alpha$  de  $\lambda = 1,5418 \text{ \AA}$ .

O índice de cristalinidade foi calculado pelo método da área, onde a cristalinidade é expressa pela razão entre a área total das regiões cristalinas e a área total do material (amorfo e cristalino) x 100 conforme a equação:

$$X_c = [H_c / (H_a + H_c)] \times 100$$

Onde:

Hc corresponde à altura do pico cristalino

Ha é a altura correspondente à fase amorfa.

### 2.3 ANÁLISE TERMOGRAVIMÉTRICA (TGA)

Todos polímeros utilizados na produção dos géis foram analisados por TGA. As análises foram realizadas em equipamento TA - série Q - modelo Q 500. As amostras foram aquecidas na faixa da temperatura ambiente até 700°C, em atmosfera inerte, com taxa de aquecimento de 10°C/min (Mateus, 2020).

### 2.4 RELAXOMETRIA NO DOMÍNIO DO TEMPO (TD-NMR)

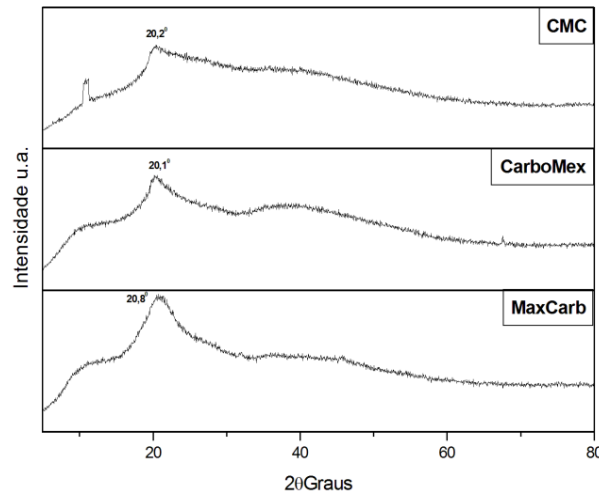
Para as determinações dos tempos de relaxação spin-rede ou longitudinal foi utilizado o equipamento RMN Maran Ultra-23 (Oxford), operando a 23 MHz para o núcleo de hidrogênio. O tempo de relaxação spin-rededos núcleos de hidrogênio foi determinado diretamente pela sequência tradicional de pulsos inversão-recuperação (intervalo de reciclo - 180° -  $\tau$  - 90° - aquisição) utilizando 40 pontos, com quatro acúmulos cada. O intervalo entre os pulsos ( $\tau$ ) teve variação de 0,1 a 27ms, as medidas foram realizadas a temperatura de 27°C. Os valores de tempo de relaxação do núcleo de hidrogênio foram extraídos dos valores da constante de tempo,  $T_1H$ , e as intensidades relativas foram obtidos por ajuste dos dados de exponencial com a ajuda do programa WINFIT. A distribuição das curvas de domínios e os valores das exponenciais foram obtidos pelo software WINDXP.

## 3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

### 3.1 ANÁLISE DE DIFRAÇÃO DE RAIOS X

Ao comparar as curvas de difração de raios X dos polímeros naturais estudados, nota-se não houve deslocamento do pico em torno de 20° da região de organização das cadeias de celulose. Por outro lado (Figura1), percebe-se um estreitamento dos picos da região cristalina das amostras de Carbomex e Maxcarb em comparação a CMC, em função do aumento do valor do grau de cristalinidade. Nos difratogramas do Carbomex e Maxcarb através da deconvolução, observa-se o aparecimento de picos, referentes formas cristalinas.

Figura 1. Perfis da difração de raios X da CMC, Carbomex e Maxcarb



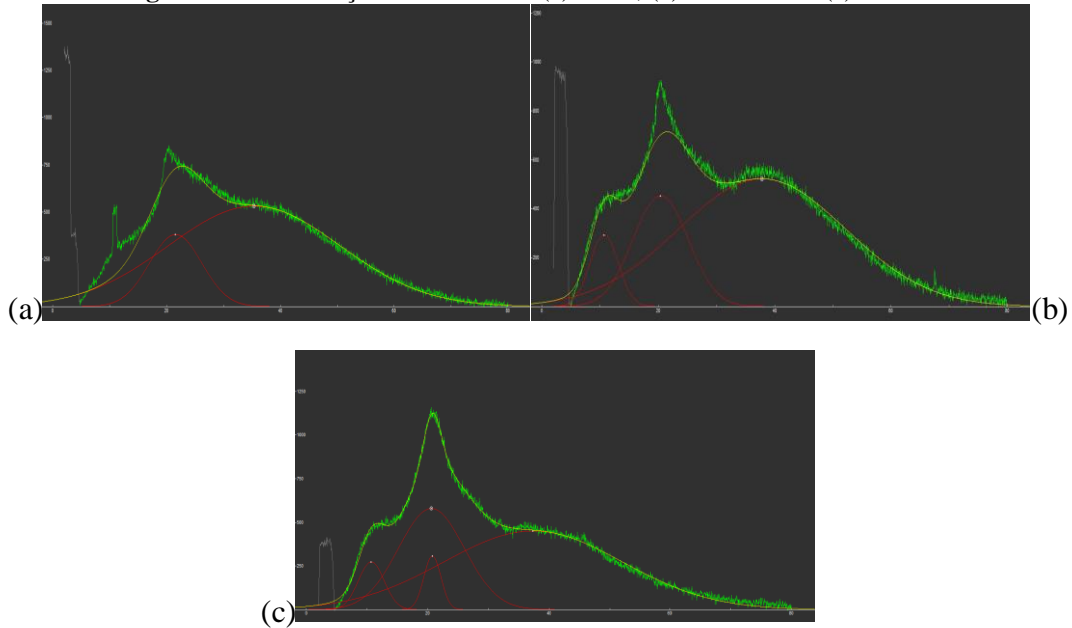
Por meio da análise dos difratogramas, foi determinado o grau de cristalinidade das amostras. Foi observado que a Maxcarb teve o maior valor do grau de cristalinidade (Tabela 1), com valor muito próximo ao do Carbomex, porém muito maior do que da CMC, que se mostrou com um halo amorfo muito maior. Essas diferenças são devidas as interações intermoleculares múltiplas que geram um material aleatório (Javanbakht & Shaabani, 2019). Já para os outros dois componentes o efeito organizacional das cadeias poliméricas é diferente, assim como as forças de interação intermolecular.

Tabela 1. Índice de cristalinidade e plano d002 determinados peladifração de raios X

Amostras	IC(%)	$2\theta_{(d002)}(^{\circ})$
CMC	18	20.2
Carbomex	<b>28</b>	20.1
Maxcarb	<b>39</b>	20.8

A Figura 2 mostra os difratogramas dos carbômeros utilizados nesta pesquisa. E evidencia da diferença organizacional dos carbômeros estudados face a estrutura organizacional dos mesmos e, por consequência, das interações intermoleculares.

Figura 2: Deconvolução das amostras: (a) CMC, (b) Carbomex e (c) Maxcarb



### 3.2 ANÁLISE TERMOGRAVIMÉTRICA

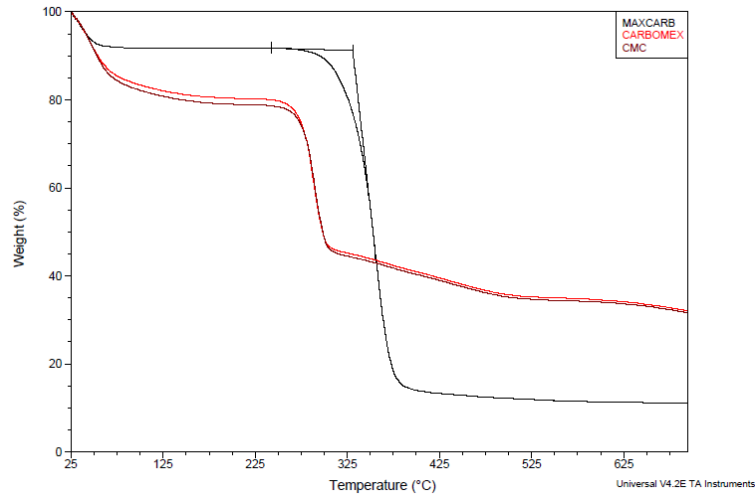
Os valores obtidos para as temperaturas de degradação (Tabela 2) mostram que o Maxcarb possui maior valor de temperatura de degradação em função do maior índice de cristalinidade que esta substância apresenta, fato este que se deve a organização estrutural deste material. Além disso, apesar da amostra Carbomex possuir grau de cristalinidade maior que a da CMC, isto não foi motivo para influenciar significativamente no aumento da estabilidade térmica para a amostra sendo igual ao valor encontrado para a CMC. Ambos foram menores do que para o valor encontrado para o Maxcarb, que é referente à diferença da estrutura organizacional.

Tabela 2. Resultados de TGA para CMC, Carbomex e Maxcarb

AMOSTRA	$T_{\text{onset}} (\pm 2^\circ \text{C})$	$T_{\text{max}} (\pm 2^\circ \text{C})$
CMC	277	289
Carbomex	275	287
Maxcarb	<b>331</b>	<b>356</b>

A Figura 3 mostra as curvas de degradação térmica dos polímeros empregados nas diferentes formulações de álcool gel.

Figura 3. Análise termogravimétrica das amostras de CMC, Carbomex e Maxcarb



### 3.3 RELAXOMETRIA NO DOMÍNIO DO TEMPO (DT-NMR)

As análises de relaxometria foram realizadas visando à determinação do tempo de relaxação spin-rede, sendo avaliada a constante de tempo de relaxação  $T_1$ , das três amostras de carbômeros, para entender as interações e a dinâmica molecular das cadeias e do comportamento em fase líquida, tendo como solvente de inchamento a água. As amostras quando em solução apresentam o mesmo comportamento em face de sua solubilidade em água e incham apresentando um comportamento similar e exibem valores de relaxação que não diferenciam significativas nos valores determinados, visto que o material está em solução/inchamento, ficando dentro do erro experimental. Já no estado sólido as interações intermoleculares que são promotoras da organização molecular se evidenciam e mostram o comportamento da dinâmica molecular de cada material, individual. Os valores de relaxação obtidos para os tempos de relaxação spin-rede ou longitudinal, que possui uma constante de tempo  $T_1H$  estão listados na Tabela 3.

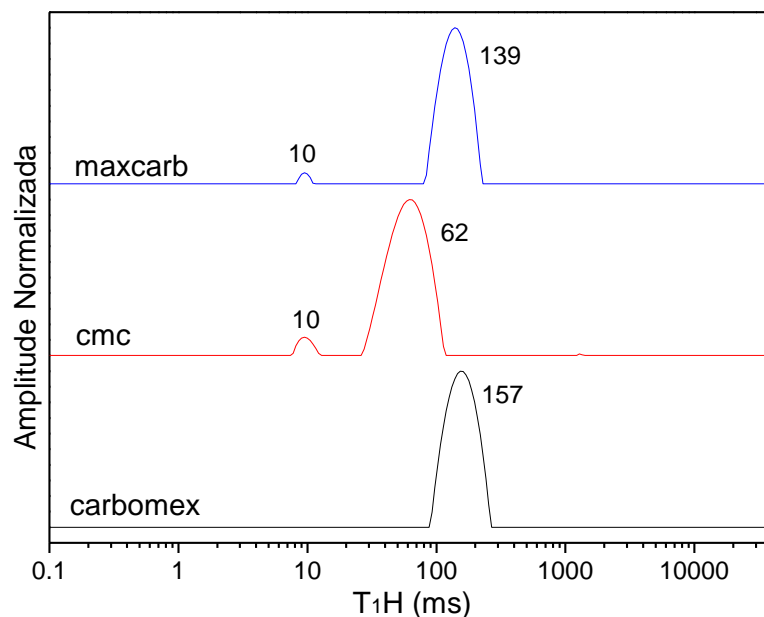
**Tabela 3.** Valores do tempo de relaxação spin-rede dos carbômeros

Amostra	$T_1H$ (ms) $\pm$ 2%
CMC	56
Carbomex	154
Maxcarb	133



Observa-se que a CMC apresentou menor valor de relaxação spin-rede, de forma geral, um valor baixo de tempo de relaxação spin-rede está associado a movimentos coletivos de grupos pequenos das cadeias, que tem maior liberdade de movimentação, esse comportamento está de acordo com o fato da CMC possuir um valor de grau de cristalinidade menor, praticamente amorfa. Esses resultados corroboram entre si, assim como a avaliação da estabilidade térmica que também foi menor em face da maior amorficidade do material. Entretanto tanto a amostra do carbômero Carbomex, quanto o Maxcarb apresentaram valores de tempos de relaxação spin-rede maiores que o da CMC e próximos entre si, devido ao maior valor de grau de cristalinidade apresentado por estes polímeros, assim como maiores temperaturas de degradação térmica. O fato da amostra de Carbomex apresentar um valor de tempo de relaxação um pouco superior ao do Maxcarb, reside na organização molecular das cadeias e o quão forte é a interação intermolecular entre elas e também pelo número de interações múltiplas geradas entre as cadeias, que também geram certa “homogeneidade” do material em face de permitir menor mobilidade molecular, vale ressaltar que ambos estão na mesma faixa de valor de tempo de relaxação. Esse comportamento também pode ser melhor observado nas curvas de relaxação, pois estas apresentam curvas mais estreitas, compatíveis com materiais mais organizados, enquanto a CMC apresenta a curva um pouco mais alargada em função da aleatoriedade das forças de interação entre as cadeias, provavelmente mais fraca, quando comparadas com as outras amostras de polímeros em estudo e, também, por ter um menor valor de grau de cristalinidade, indicando que o material é mais amorfo (Figura 4).

Figura 4: Curvas de Domínio de relaxação dos polímeros empregados para a geração dos álcoois em gel.



### 3.4 CONTROLE DE QUALIDADE E ALCOOMETRIA

Os valores de pH ficaram dentro do previsto para uma formulação de álcool em gel, na faixa de 6,7. Todas as formulações apresentaram-se estáveis após 90 dias mantidas em temperatura ambiente, sem qualquer alteração na cor, odor e viscosidade. A formulação de CMC apresentou característica levemente mais pegajosa quando comparada às formulações de Maxcarb e Carbomex. Ao final, todas as formulações apresentaram a concentração final de 77° GL.

### 4 CONCLUSÃO

A análise dos polímeros utilizados para a geração de álcool gel foi um marco para o entendimento dos seus processos de inchamento e condições de geração do álcool, focando em sistemas não alergênicos e de alta importância na qualidade de higienização pessoal. Cabe ressaltar que a relaxometria foi fundamental para o entendimento do comportamento molecular e consequente geração de um álcool gel de qualidade.

### AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem as Agências de fomento, CAPES, CNPQ e FAPERJ, pelo apoio as bolsas.

### REFERÊNCIAS

- COSTA, A.C., LEITE, H.W.S., SANTOS, L.C., AMORIM, M.S., SILVA, K.M.R., ARAÚJO, E.T.H., Efeitos antimicrobianos, *in vitro*, de sabonetes líquidos contendo Triclosan frente cepas de *Escherichia coli* e *Staphylococcus aureus*. Revista Prevenção de Infecção e Saúde. 4, 7060, 2018.
- BRASIL, Ministério da Saúde. Agência Nacional de Vigilância Sanitária. Resolução da diretoria colegiada- RDC nº 42, de 25 de outubro de 2010.
- SANTOS, A. A. M.; VEROTTI, M. P.; SANMARTIN, J. A.; MESIANO, E. R. A. B.. Importância do álcool no controle de infecções em serviços de saúde. RAS-Vol.4. Num. 16. Jul - Set.2002.
- MAGALHÃES, W. C. P., Alternativas para Fabricação de Álcool em Gel, Cosmetics online, 389, 2020.
- GUGLIELMI, D., NEVES, W. F. DAS, BUOSO, A., Caracterização da Carboximetilcelulose Comercial, Cerâmica Industrial, 13 (5), 2008.
- ANVISA. AGENCIA NACIONAL DE VIGILÂNCIA SANITÁRIA. Farmacopeia Brasileira, volume 1. 5ª Ed. Brasilia, 2010b.

## **Brazilian Journal of Development**

JAVANBAKHT, S., SHAABANI, A., Carboxymethyl cellulose-based oral delivery systems. *International Journal of Biological Macromolecules*, 133, 2019.

MATEUS, D. N., BASTOS, D. C., LÍBANO, E. V. D. G., PEREIRA, P. S. DA C.. Physical mechanical, thermal, structural and morphological behavior in post consumption high density polyethylene composites and short sisal fibers (HDPEpc / FS) with and without compatibilizer. *Brazilian Journal of Development*. v. 6, n.5 , 2020.

TOIGO, L., VALDEZ, R. H., FALCONI, F. A., MIZUTA, H. T. T., Antimicrobial Activity of Gel Alcohol, *Brazilian Journal of Development*, v. 6, n. 7, 2020.

SARAIVA, E. M. S., RICARTE, E. C., COELHO, J. L. G., SOUZA, D. F., FEITOSA, F. L. DA S. FEITOSA, ALVES, R. S. A., COSTA, G. M. M. DE O., SANTANA, W. J., Impact of pandemia by Covid-19 on the provision of personal protection equipment, *Brazilian Journal of Development*, v. 6, n. 7, p. 43751-43762, 2020