

ESTUDO E CARACTERIZAÇÃO DAS PROPRIEDADES VIBRACIONAIS DE ALGUNS COMPOSTOS ORGANOSSULFURADOS PRESENTES NO ALHO

II Encontro de Iniciação Acadêmica

Rebeca de Araujo Silva, Valder Nogueira Freire

Estudos sobre o alho têm indicado sua aplicação no combate a doenças crônicas associadas ao envelhecimento, como arteriosclerose, arritmia cardíaca, formação de catarata, derrame cerebral e câncer – indicando ser esse nutracêutico uma fonte de compostos promissores. Zhou e Zhuang (2011) mostraram que o consumo de vegetais do gênero *Allium* está associado à diminuição da incidência de câncer de estômago. Outros estudos mostram efeitos preventivos do alho e da cebola em cânceres como o colorretal e renal. Com base na literatura indicando os efeitos positivos do alho, na aceitação da atividade antimetastática de compostos organossulfurados e do seu papel na prevenção da atividade carcinogênica, é aqui realizado o estudo e caracterização de alguns dos compostos organossulfurados presentes no alho que podem ser os determinantes de sua bioatividade. Foram calculados os espectros de infravermelho e Raman dos compostos cicloalliina e metiina, baseados na Teoria do Funcional da Densidade (DFT) implementada no software Gaussian 09; para solvatação do meio, foi usado o modelo de polarização contínua(PCM) e vácuo(VAC). Os estudos da metiina e da isoalliina ainda estão em andamento. As bandas experimentais assinaladas a partir da análise dos espectros teóricos são úteis para a caracterização dos compostos organossulfurados presentes no alho e para futuros trabalhos neste campo de pesquisa. Finalmente, foi realizada uma atribuição completa dos modos normais de vibração. O software utilizado para a realização deste trabalho foi o Gaussian 09, que encontra-se disponibilizado no CENAPAD-CE.

Palavras-chave: Propriedades Vibracionais. Câncer. Modelagem Computacional. Espectroscopia.