

ANÁLISE DE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL DO DITERPENO SONDERIANINA

BEATRIZ GONÇALVES CRUZ, HÉLCIO SILVA DOS SANTOS, DINIZ MACIEL DE SENA JUNIOR, INGRID MIKAELA MOREIRA DE OLIVEIRA, ALEXANDRE MAGNO RODRIGUES TEIXEIRA

Croton é um extenso gênero compreendendo cerca de 1.300 espécies da família Euphorbiaceae. Uma dessas espécies é o Croton blanchetianus, restrito a região do semi-árido brasileiro, conhecido popularmente como marmeleiro-preto. Informação farmacológica refere-se a essa planta como tendo propriedades anti-inflamatórias e gastrointestinais. O Diterpeno Sonderianina foi isolado a partir do caule do Croton blanchetianus, sua estrutura foi elucidada por Ressonância Magnética Nuclear e por difração de raios-X. Nesse trabalho realizamos um estudo dos cristais por espectroscopias Raman (FT-Raman) e Infravermelho (FTIR-ATR), buscando identificar seus principais modos de vibração. O espectro FT-Raman foi obtido no espectrômetro Bruker RFS100/S FTR system, o espectro FTIR-ATR foi obtido no Agilent Technologies Cary 600 series FT-IR spectrometer. Os espectros de FTIR-ATR e FT-Raman de amostras policristalina desse cristal foram registrados à temperatura ambiente nas regiões 400 cm⁻¹ a 4000 cm⁻¹ e 50 cm⁻¹ a 4000 cm⁻¹, respectivamente. Para a realização dos cálculos computacionais DFT foi utilizado o programa Gaussian03, as atribuições das vibrações moleculares foram realizadas usando a Distribuição de Energia Potencial (PED%). Os cálculos da Teoria do Funcional da Densidade (DFT) foram realizados utilizando o funcional de correlação Lee-Yang-Parr B3LYP e o conjunto de base 6-31 G (d, p). A partir destes cálculos obtivemos os parâmetros geométricos da estrutura otimizada da molécula e a classificação dos modos normais de vibração. Nos espectros experimentais foram observados 45 bandas FT-IR e 62 bandas Raman. Os números de onda 1696 cm⁻¹ e 1703 cm⁻¹, observados no espectro Raman e no espectro Infravermelho correspondem a deformações do tipo estiramento (?) da Carbonila (C=O). As frequências calculadas estão em boa concordância com aquelas obtidas experimentalmente. Este acordo permitiu atribuir os modos normais presentes nos espectros FTIR-ATR e FT-Raman desse cristal.

PALAVRAS-CHAVE: ESPECTROSCOPIA INFRAVERMELHA E RAMAN, CROTON SONDERIANINA

ÁREA TEMÁTICA: FÍSICA

FORMA DE APRESENTAÇÃO: PÔSTER