

ESTUDO DAS PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E VIBRACIONAIS DO COMPOSTO 1,8-CINEOL

IGOR KLEBER CAMPOS LIMA, MARIA REGIVÂNIA XAVIER, ALEXANDRE MAGNO RODRIGUES TEIXEIRA

O Composto químico denominado 1,8-cineol ou eucaliptol possui fórmula molecular $C_{10}H_{18}O$ e trata-se de uma substância natural encontrada em diversas plantas, principalmente no gênero *Eucalyptus*. Possui efeito vasorelaxante na musculatura lisa do intestino e das vias respiratórias, diversas ações terapêuticas contra reumatismo, tosse e asma brônquica. Neste trabalho foi realizado um estudo das propriedades estruturais e vibracionais do eucaliptol através de cálculos computacionais usando a Teoria do Funcional da Densidade (DFT). A atribuição das vibrações moleculares foi baseada na Distribuição de Energia Potencial (PED%), calculadas usando o software Veda. O composto $C_{10}H_{18}O$ apresenta 29 átomos, portanto, são esperados 81 modos vibracionais para esta molécula. No espectro teórico foi possível a identificação de 20 bandas infravermelha com diversos níveis de intensidade vibracional, destas a banda mais intensa foi registrada em 3055 cm^{-1} correspondente a um estiramento do carbono e hidrogênio. As frequências calculadas foram ajustadas pelo fator de escala 0,9613 de modo a obter uma melhor concordância com bandas infravermelho experimentais do composto 1,8-cineol.

PALAVRAS-CHAVE: 1,8-CINEOL; CÁLCULOS DFT; ATRIBUIÇÃO VIBRACIONAL

ÁREA TEMÁTICA: BIOLOGIA MOLECULAR

FORMA DE APRESENTAÇÃO: PÔSTER