

Perfis vibracionais dos compostos organosulfurados Aliina e Metiina

Leonardo F. Serafim^{1*} (PG), Antônio A. G. Moreira¹ (PG), Lute R. de Souza¹ (PG), Pedro de Lima-Neto¹ (PQ), Valder N. Freire² (PQ). *leonardofariaslfs@yahoo.com.br

¹ Departamento de Química Analítica e Físico-Química UFC

² Departamento de Física UFC

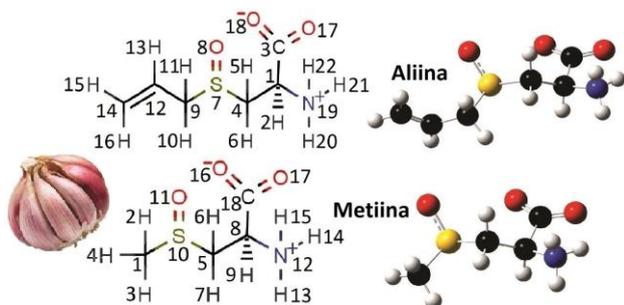
Palavras Chave: Alho, Aliina, Metiina, Anticâncer, IR, Raman.

Introdução

Do Egito antigo até os tempos atuais [1], o alho (*Allium sativum*, compreendendo 600 espécies conhecidas [2]) é considerado uma planta medicinal capaz de prevenir doenças pela sua ação hiperlipidêmica, antiplaquetária e procirculatória, ajudando na prevenção de gripes e resfriados via ação no sistema imunológico, exibindo também atividade anticâncer. Vários relatórios clínicos revelam a diminuição do nível de colesterol em indivíduos que incluíram alho em sua dieta [3].

O alho é composto majoritariamente de água (65%), carboidratos, compostos sulfurados, proteínas, fibras e aminoácidos livres. De fato, 90% das investigações dos compostos com atividade biológica no alho estão focados nas suas moléculas sulfuradas, sendo a aliina e outros dois compostos γ -glutamilcisteinados responsáveis por sua ampla atividade terapêutica [3].

Figura 1. Estrutura planar e conformêros de menor energia da Aliina e Metiina na água (PCM).



Resultados e Discussão

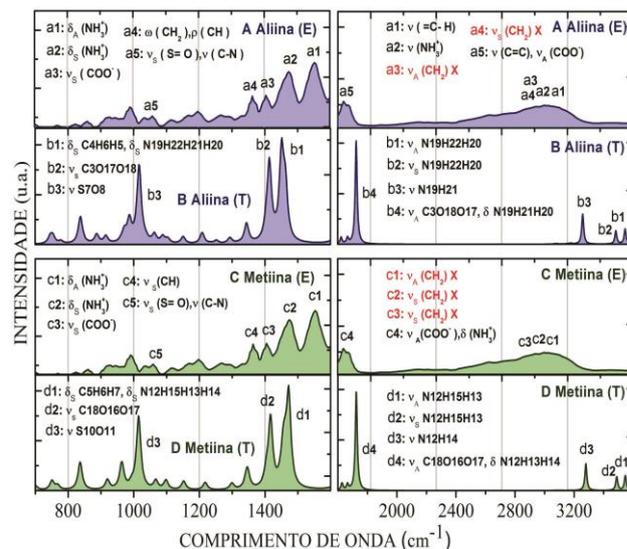
Neste trabalho, avaliam-se as propriedades vibracionais de dois compostos organosulfurados presentes no alho, aliina e metiina. Apresenta-se resultados de medição do IR; com cálculos teóricos realizados via teoria da funcional da densidade (DFT) com o funcional M062x e base 6-311+G(d,p) obtêm-se o IR e Raman. Os conformêros de menor energia foram obtidos após otimização da geometria (Fig. 1) com a utilização do software comercial Gaussian 09 para cálculos DFT.

Os espectros IR teóricos da aliina e metiina foram comparados aos espectros experimentais publicados por Xial *et al.* [4], ver Fig. 2 – os espectros Raman não são mostrados aqui. As atribuições dos picos foram feitas de acordo com o software Veda (*Vibrational Energy Distribution Analysis*).

37^ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Como podemos observar na Fig. 2, as atribuições são equivalentes na maioria dos picos, porém levemente deslocadas: o pico característico da ligação entre enxofre e oxigênio ocorre em 1048 cm^{-1} no espectro experimental e 1017 cm^{-1} no teórico. O pico da ligação dupla entre carbonos, que diferencia ambas as espécies está em 1617 cm^{-1} no espectro experimental e em 1725 cm^{-1} no espectro teórico. Os picos característicos da presença do grupo NH_3^+ são bem definidos nos espectro teóricos enquanto que no experimental as atribuições originais de Xial *et al.* [4] estão equivocadas.

Figura 2. (A) IR experimental da aliina, (B) IR teórico PCM da aliina, (C) IR experimental da Metiina, (D) IR teórico PCM da metiina.



Conclusões

Foi possível se fazer atribuições para os modos vibracionais da aliina e metiina compatíveis com os resultados obtidos experimentalmente. Desvios inferiores a 10% nas frequências dos modos calculados por DFT em relação aos dados experimentais foram obtidos.

Agradecimentos

Ao CENAPAD-CE pelo tempo de processamento e utilização do Gaussian 09, e a CAPES e CNPQ.

¹ R.S. Rivlin, J. Nut. 951S (2001).

² K. Rahman, Ageing Res. Rev. 39-56 (2003).

³ H. Amagase, J. Nut. 716S (2006).

⁴ X. Wang, *et al.*, Spect. Spectral Anal. 33, 1570-1574 (2013).