



ESTUDO DAS BIOMOLÉCULAS DO FRUTO DO MANDACARU POR ESPECTROSCOPIA E SIMULAÇÃO MOLECULAR

José Lucas da Silva¹, Kennedy Leite Agra²

RESUMO

No presente projeto foram estudadas as biomoléculas constituintes do Fruto do Mandacaru (*Cereus jamacaru* D.C). Fruto típico do semiárido da região Nordeste do Brasil, e que possuem um grande potencial em biomoléculas funcionais, tornando-o fonte de inúmeras propriedades a serem ainda descobertas. Neste contexto, o objetivo geral do projeto foi identificar e estudar as biomoléculas deste fruto, fazendo o tratamento experimental das amostras coletadas, e computacional das moléculas previstas para o mandacaru, os resultados foram confrontados para determinar os grupos funcionais das biomoléculas, além disso foram estudados os efeitos de solvatação e oxidação. Para isso foram utilizados métodos de extração simples e análise por espectroscopia UV-Visível, que tem a capacidade de elucidar a composição, a estrutura e as propriedades da matéria por meio de transições eletrônicas. Aliada às técnicas experimentais foram usadas simulações computacionais, que através da Teoria do Funcional da Densidade (DFT), possibilitaram obter informações complementares aos dados experimentais. Como resultados, foram obtidos espectros experimentais para as sementes, mesocarpo e epicarpo que compõem, e espectros teóricos das moléculas previstas na literatura, ajustando a comparação de ambos para estudo.

Palavras-chave: espectroscopia, simulação molecular, fruto do mandacaru.

¹Graduando em Física, UAF, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: jose.silva@estudante.ufcg.edu.br

²Doutorado, Professor, UAF, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: Kennedyagra@df.ufcg.edu.br