



ESTUDO DAS BIOMOLÉCULAS DO BACURI POR ESPECTROSCOPIA E SIMULAÇÃO MOLECULAR

José Lucas da Silva¹, Kennedy Leite Agra²

RESUMO

No presente projeto, foram estudadas as biomoléculas constituintes do Bacuri (*Platonia insignis*, *Clusiaceae*), fruto típico da região Norte do Brasil e de significativa utilidade farmacológica e industrial em sua comunidade local, e que possuem um grande potencial em biomoléculas funcionais, tornando-o fonte de inúmeras propriedades a serem ainda descobertas. Nesse contexto, foi caracterizado as biomoléculas do bacuri do ponto de vista da física molecular. 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 as técnicas experimentais foram usadas simulações computacionais, que através da Teoria do Funcional da Densidade (DFT), possibilitaram obter informações mais complementares aos dados experimentais, assim tornado a análise mais robusta.

Palavras-chave: espectroscopia, simulação molecular, biomoléculas funcionais, bacuri.

¹Aluno do Curso de Física, Departamento de Física, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: jose.silva@estudante.ufcg.edu.br

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

STUDY OF BACURI BIOMOLECULES BY SPECTROSCOPY AND MOLECULAR SIMULATION

ABSTRACT

In this project, the constituent biomolecules of Bacuri (*Platonia insignis*, Clusiaceae) were studied, a typical fruit from the North region of Brazil and of significant pharmacological and industrial utility in its local community, and which have a great potential in functional biomolecules, making it a source of countless properties yet to be discovered. In this context, the bacuri biomolecules were characterized from the point of view of molecular physics. For this, simple extraction methods and analysis by UV-Visible spectroscopy were used, which has the ability to elucidate the composition, structure and properties of matter through electronic transitions. Allied to the experimental techniques, computational simulations were used, which through the Density Functional Theory (DFT), made it possible to obtain more complementary information to the experimental data, thus making the analysis more robust.

Keywords: spectroscopy, molecular simulation, functional biomolecules, bacuri.

