

ESTUDO IN SILICO DAS PROPRIEDADES ESTRUTURAIS DO BIFLAVONÓIDE AMENTOFLAVONA

IX Encontro de Pesquisa e Pós-Graduação

Márcia Machado Marinho, Ricardo Pires dos Santos, Alice Maria Costa Martins

O biflavonóide amentoflavona apresenta diversas atividades biológicas, como antiviral, antifúngica, antioxidante e anti-inflamatória. Os avanços computacionais permitem, atualmente, o crescimento dos estudos in silico, onde através de métodos baseados na equação de Schroedinger, podem ser realizados cálculos que permitem caracterizar eletrônica e estruturalmente uma molécula, como estudar a interação entre a molécula e seu receptor dando suporte para a concepção de Drug Design, que se baseia no desenvolvimento de um fármaco a partir de uma estrutura totalmente nova ou modificando uma estrutura preexistente, visando identificar um composto (adequado para o teste clínico) candidato a fármaco com uma maior atividade biológica, associado a uma diminuição nos efeitos colaterais. O presente trabalho teve como objetivo caracterizar eletrônica e estruturalmente o biflavonóide amentoflavona como etapa inicial de futuros estudos de acoplamento molecular. Para a otimização estrutural através do princípio de minimização de energia foi utilizado a teoria do funcional de densidade (DFT), com funções híbridas B3LYP e a base 6-31G, usando o DMSO como solvente, sendo os cálculos realizados utilizando o package ORCA versão 3.0.3, obtendo a estrutura molecular com energia potencial de -51829.92315 eV. Os arquivos output gerados pelo cálculo de otimização estrutural, geraram o mapa de superfície do potencial eletrostático (MESP). No MESP, podemos observar as regiões de maior nucleofilicidade nos átomos de oxigênio (O3, O4, O5, O6, O7, O8, O9, O10, O11) e a região mais eletrofílica nos átomos de hidrogênio (H41, H42, H45, H46), justificada pela diferença de eletronegatividade entre os átomos de oxigênio e hidrogênio. A modelagem molecular, com o auxílio da computação moderna, tornou-se uma importante ferramenta no processo do desenvolvimento racional de fármacos, permitindo a caracterização estrutural, sendo esta uma etapa inicial para futuros estudos de acoplamento molecular.

Palavras-chave: Amentoflavona. In silico. DFT.