

Análise das superfícies eletrônicas obtidas em compostos de atividade antioxidante extraídos da espécie nacional *Arrabidaea samydoides*

Luciana Scotti¹ (PQ)*, Marcus Tullius Scotti³ (PG), Carmen Lucia Cardoso² (PQ), Patrícia Mendonça Pauletti² (PQ), Ian Castro-Gamboa² (PQ), Vanderlan da Silva Bolzani² (PQ), Maria Valéria Robles Velasco¹ (PQ), Carla Maria de Souza Menezes¹ (PQ), Elizabeth Igne Ferreira¹ (PQ)

*lscotti@dialdata.com.br

¹Faculdade de Ciências Farmacêuticas, USP; ²Instituto de Química, UNESP; ³Instituto de Química, USP.

Palavras Chave: modelagem molecular, superfícies eletrônicas, atividade antioxidante.

Introdução

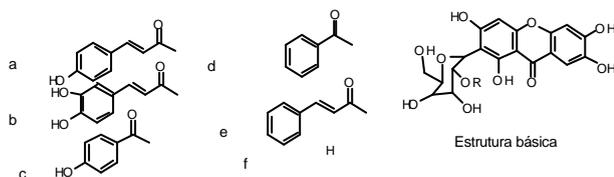
Compostos de atividade antioxidante têm importância em várias áreas da terapêutica. O conhecimento aprofundado das estruturas molecular e eletrônica desses derivados é de relevância para se planejar análogos mais eficazes.

Algumas superfícies eletrônicas representam o comportamento molecular nas formas neutras, radicalar e cátion-radicalar; necessárias à atividade antioxidante. Estas são baseadas segundo a significância que poderiam representar para o estado eletrônico de cada espécie considerada e no processo global de neutralização antiradicalar. Podem ser visualizadas nos estudos de modelagem molecular² por meio do cálculo de superfícies orbitales, densidades eletrônicas, mapa eletrostático total (MEP) e ainda, analisando-se a densidade de *spin* do composto em questão.

Nesta pesquisa, compostos extraídos da espécie *Arrabidaea samydoides* (Figura 1) foram avaliados quanto às superfícies eletrônicas obtidas.

Figura 1. Estrutura básica e seus substituintes isolados da *A. samydoides*.

Os compostos foram desenhados empregando-se o



programa de modelagem molecular Spartan for Windows v.4.0, a geometria foi otimizada por AM1 (Austin Model 1)¹ e o confômero de energia mínima foi selecionado para obtenção das superfícies eletrônicas das formas neutras, radicalares e cátion-radicalares.

Resultados e Discussão

Nas formas neutras observadas nos compostos d, e, f observou-se que os orbitais HOMO concentram-se sobre a região do triplo anel fundido, porém quando a molécula apresenta substituinte hidroxilado como a e b os lóbulos de HOMO estão sobre o anel benzênico do grupo substituinte. Tal análise pode ser

30ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

evidenciada pela superfície de HOMO e MEP, demonstrando maior densidade eletrônica onde ocorre concentração de orbitais HOMO.

O comportamento das superfícies eletrônicas obtidas nas espécies neutras de a e b podem ser observadas na Figura 2. O composto c apresenta comportamento semelhante à d, e e f, apesar de possuir substituinte hidroxilado; indicando maior ressonância. Este fato ocorre, provavelmente, devido à maior proximidade entre o grupo hidroxila e a dupla ligação C=O.

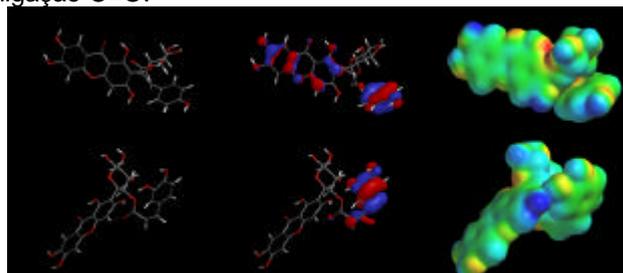


Figura 2 - Confômeros de menor energia mínima dos compostos a (superior) e b (inferior), e superfícies de HOMO e MEP, respectivamente, na faixa do Mapa de Potencial Eletrostático (MEP) (-63/+43 kcal/mol), superfície de HOMO (1.400e-00 (vermelho escuro) a 00200 (azul escuro) kcal/mol).

Nas superfícies calculadas na forma radicalar nos compostos extraídos da espécie *Arrabidaea samydoides* observa-se que, independente do local da abstração, o comportamento eletrônico é evidenciado sobre a região do triplo anel fundido. No caso das formas cátion-radicalar, observou-se o comportamento eletrônico desta espécie intermediária, destacando-se a superfície e densidade de LUMO. Estas demonstram maior capacidade de receber elétrons pelos anéis benzênicos da estrutura básica da molécula.

Conclusões

O MEP, o Mapa de densidade de HOMO e o mapa de distribuição orbitalar de HOMO da forma molecular neutra demonstram a importância de maior concentração eletrônica sobre o anel fenólico doador de elétron neutralizador da reatividade radicalar para a atividade antioxidante.

Agradecimentos

CAPES e CNPq pelo apoio financeiro.

¹ .Allinger, N. L. A hydrocarbon force field utilizing V1 and V2 torsional terms. *Journal of the American Chemical Society*, v.99, p.8127-8134, 1977.

² .Cohen, N. C. *Guidebook on molecular modeling in drug design*, San Diego: Academic Press, 1996. p.361.