

Estudo químicoquântico semiempírico e *ab initio* da relação estrutura eletrônica-atividade biológica dos diterpenos isolados de *Stemodia foliosa*.

Eriosvaldo Florentino Gusmão^{1*} (IC), José Cândido Selva de Oliveira² (PG), Lourinalda Luiza Dantas da Silva Selva de Oliveira¹ (PQ) e Cíntia Beatriz de Oliveira¹ (PQ).

1*- Unidade Acadêmica de Serra Talhada - UFRPE/UAST, 2- Laboratório de Pesquisa em Produtos Naturais; IQ - UFBA. eriosvaldo.gusmao@gmail.com

Palavras Chave: Semi-empírico, diterpenos, *Stemodia foliosa* Benth.

Introdução

Do ponto de vista fitoquímico só duas espécies deste gênero *Stemodia* têm sido estudadas, *S. maritima* e *S. chilensis* das quais foram isoladas substâncias diterpênicas tetracíclicas de núcleo estemodano. Estes diterpenóides apresentam atividade antiviral, inclusive para o vírus HIV¹⁻². A partir da *Stemodia foliosa* Benth foram isoladas substâncias de natureza terpênica, como diterpenos de núcleo labdano, produzidas apenas por esta espécie, e aromática, apresentando atividades biológicas, sendo a principal a antimicrobiana³. Neste trabalho, apresentamos o estudo químicoquântico semiempírico e *ab initio* da relação estrutura eletrônica-atividade biológica para os diterpenos isolados de *S. foliosa*.

Resultados e Discussão

Realizou-se um estudo comparativo entre os programas Gaussian 03 W⁴ e HyperChem 7.5 for Windows⁵. O GaussView 3.0⁴ também foi utilizado para a visualização dos resultados do Gaussian. Utilizando esses softwares, foi possível correlacionar a estrutura eletrônica com a atividade biológica das moléculas de interesse. Cálculos *ab initio* foram feitos pelo Gaussian, através do método Hartree-Fock-Roothaan (RHF)⁶. A geometria molecular foi otimizada a partir de dados coletados da espectroscopia RMN. A partir desses dados, a otimização total das geometrias foi computada, utilizando-se o algoritmo de otimização de Berny⁷ com o critério de convergência "pesado" utilizado nos cálculos do campo autoconsistente. O momento de dipolo foi calculado a partir de cargas atômicas derivadas do potencial eletrostático⁸ para identificação das características estereoeletrônicas responsáveis pela atividade biológica das moléculas estudadas. Pelo HyperChem calculamos as mesmas estruturas moleculares, através do método semiempírico AM1⁹, que também faz uso das bases matemáticas do campo autoconsistente. Analisando os resultados, verifica-se que as moléculas ativas SF2 e SF3 apresentam componentes positivas do momento de dipolo no eixo de coordenadas Y, ao contrário da molécula não ativa SF1, a qual apresenta componente negativa no eixo Y. A

metilação da molécula SF3, produzindo a SF4, preserva a componente positiva do momento de dipolo no eixo Y, indicando a possibilidade de haver atividade biológica nesta molécula. Devido ao fato de possuímos poucas moléculas de terpenos para estudarmos, não pudemos avaliar a influência das componentes X e Z na atividade biológica da molécula SF4.

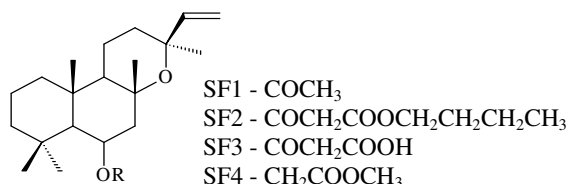


Figura 1: Esqueleto dos diterpenos em estudo e seus respectivos radicais (OR).

Conclusões

Através dos resultados obtidos por ambos os programas, verificou-se que o momento de dipolo pode ser correlacionado com a atividade biológica dos terpenos, ressaltando a importância dessa propriedade molecular nesse tipo de atividade.

Agradecimentos

Ao professor Dr. Kelson Mota Teixeira de Oliveira, da Universidade Federal do Amazonas, pelos programas Gaussian e GaussView.

¹Chamy, M. C., Piovano, M., Garbarino, V. *Phytochemistry* 1991, 30, 1919.

²Hufford C. D. J. *Nat. Prod.* 1989, 51, 367.

³Silva, L. L. D., Nascimento, M. S., Silva, D. H. S., Bolzani, V. S. *Planta Médica*, **2002**, 68, 1137.

⁴<http://www.gaussian.com/>

⁵<http://www.hyper.com/>

⁶C.C.J. Roothaan, Rev. Mod. Phys. 23(1951)69.

⁷H.B. Schlegel, J. Comp. Chem. 3(1982)214.

⁸C.M. Breneman and K.B. Wiberg, J. Comp. Chem. 11(1990)361.

⁹Dewar, M. J. S., Zoebisch, E. G., Healy, E. F. and Stewart, J. J. P., *Journal of the American Chemical Society*, **107**, 3902, (1985).