

Aflatoxinas: Relação entre Estrutura Eletrônica e Atividade Carcinogênica

Keyla Mirelly Nunes de Souza¹ (IC)*, Cíntia Beatriz de Oliveira¹ (PQ).

*keyla.mirelly@gmail.com.

¹ Universidade Federal Rural de Pernambuco -Unidade Acadêmica de Serra Talhada, Fazenda Saco S/N, Caixa Postal 063, CEP 56.900-000, Serra Talhada, PE

Palavras Chave: Aflatoxinas, B3LYP 3-21G, momento de dipolo, modo vibracional.

Introdução

As aflatoxinas (AFs) são micotoxinas, fungos produzidos pelas espécies *A. flavus*, *A. parasiticus* e *A. nomius*. Encontram-se em grãos e no leite. Classificam-se em B1, G1, M1 (nível de risco 1, carcinogênicas) e B2, G2 e M2 (nível 2, formam tumores) [1] (Figura 1). Podem interagir diretamente com o DNA ou via proteína p53, dando origem aos tecidos tumorais.[2,3]. Neste trabalho, o momento de dipolo, a descrição dos modos vibracionais e a energia dos orbitais de fronteira das AFs foram estudados para se correlacionar estrutura eletrônica com atividade carcinogênica. As moléculas foram construídas e pré-otimizadas pelo HyperChem 8.0 [4] e calculadas pelo Gaussian 03W [5], no nível de teoria B3LYP/3-21G. Os resultados foram visualizados pelo GaussView. [5]. É uma pesquisa pioneira e relevante, pois as condições climáticas da região favorecem o crescimento dos fungos.

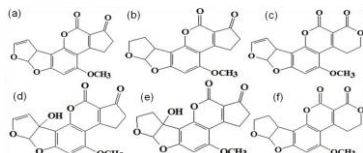


Figura 1 Estrutura química das aflatoxinas: (a) AFB1; (b) AFB2, (c) AFG1; (d) AFG2; (e) AFM1; (f) AFM2.

Resultados e Discussão

Tabela 1. Valores dos principais modos vibracionais

	ν (cm ⁻¹)	IR	MV
AFB1	1845,0	480,1	ν_s C=O
	1649,3	375,1	ν_s C-C (anel aromático)
	1624,0	348,4	ν_s C-C (anéis)
	971,0	230,6	ν_s C-O (anel furano)
AFB2	1845,1	478,6	ν_s C=O
	1648,2	463,7	ν_s C-C (anel aromático)
	1620,1	396,6	ν_s C-C (anéis)
	1052,7	228,0	ν_s C-O (anel furano)

A Tabela 1 mostra os modos vibracionais (MV) de maior intensidade (IR) para AFB1 e AFB2. A do tipo 1 apresenta intensidades maiores que a do tipo 2. Este padrão se repete para as demais moléculas, o

que comprova os estudos realizados por Ferreira *et al* com relação à sua atividade carcinogênica [1].

Tabela 2. Momentos de dipolo (μ), energias de HOMO (EH) e LUMO (EL) e a diferença entre elas.

	AFB1	AFB2	AFG1	AFG2	AFM1	AFM2
EH (kcal/mol)	-141,19	-141,19	-143,70	-143,70	-143,07	-146,84
EL (kcal/mol)	7,53	0,63	10,67	1,26	4,39	4,39
ΔE	148,72	141,83	154,36	144,95	147,46	151,23
μ	7,8438	7,5255	9,2647	8,9851	8,0661	8,1452

Tanto os valores de ΔE como os do momento de dipolo (μ) das AFs do tipo 1 são maiores que as do tipo 2, com exceção da M1, como mostra a Tabela 2. [1,3]. Os momentos de dipolo (μ) apresentam significativa regularidade e os valores foram bem elevados, o que evidencia sua atividade carcinogênica.

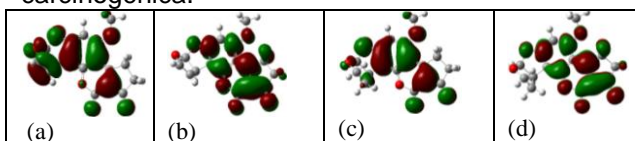


Figura 2 Orbitais de fronteira (a) AFB1-HOMO, (b) AFB1-LUMO, (c) AFB2-HOMO e (d) AFB2-LUMO

A Figura 2 mostra que apenas o orbital HOMO da AF de nível 1 é o que apresenta distribuição de orbitais atômicos no anel furano, intensificando sua atividade. Tal padrão se repete para as demais AFs.

Conclusões

A função de base utilizada descreve satisfatoriamente as propriedades relacionadas à estrutura eletrônica, comprovando a intensa atividade dessas moléculas. É possível, portanto, compreender a origem da atividade carcinogênica das AFs com base nas propriedades estudadas.

Agradecimentos

Ao Prof. Dr. Kelson Mota Teixeira de Oliveira (UFAM), pelo programa Gaussian 03W.

¹ FERREIRA, H., *et al.* Aflatoxinas: um risco a saúde humana e animal. *Ambiência*, Guarapuava, PR, v. 2, n.1, p.113-127, jan/jun 2006.

² CHAN, Kin-Tak, *et al.* *In vitro* aflatoxin B1-induced p53 mutations. *Cancer Letters* 199 (2003) 1-7.

³ IYER, R. S., *et al.* Adenine Adduct of Aflatoxin B₁ Epoxide. *Journal of the American Chemical Society*, v.116, n.20, oct. 5, 1994.

⁴ Homepage: <http://www.hyper.com/>

⁵ Homepage: <http://www.gaussian.com/>