

O USO DA MODELAGEM MOLECULAR E DOS PROGRAMAS COMPUTACIONAIS PARA O ESTUDO DE COMPOSTOS BIOLÓGICAMENTE ATIVOS

IGOR KLEBER CAMPOS LIMA, ALEXANDRE MAGNO RODRIGUES TEIXEIRA

A disponibilidade de programas computacionais de química e os bancos de dados em rede são, atualmente, ferramentas fundamentais para a descoberta de novos compostos biologicamente ativos. Estas informações permitem uma análise rápida da atividade biológica versus propriedades físico-químicas de uma série de moléculas. Nesse sentido, a modelagem molecular tem se firmado não somente como uma ferramenta indispensável para o estudo e investigação das propriedades moleculares, mas também na otimização de um protótipo já existente ou obtido pelo próprio estudo de modelagem molecular. Este estudo objetiva compreender, assimilar e relacionar a modelagem molecular com o avanço de recursos computacionais em termos de software (programas de modelagem molecular) para a obtenção de compostos bioativos. Nesse sentido, foi realizado um levantamento bibliográfico no portal de periódicos da CAPES e estudo de tutoriais presentes no Laboratório de Simulações e Espectroscopia Molecular - LaSEMol. Assim, foi constatado que os seguintes programas computacionais: Chem3D, Gaussview, Gaussian e Chemcraft são os softwares mais utilizados para o desenho de moléculas, cálculos de química quântica ou análise de dados das propriedades físico-químicas das moléculas, dessa forma podemos analisar as ligações químicas, calcular energias de ionização, estudar os modos normais de vibração e identificar polarizabilidades e susceptibilidades das moléculas de interesse. Portanto, esse estudo desenvolveu-se de forma a facilitar e otimizar o processo de compostos bioativos e avaliar a efetividade dos diferentes grupos moleculares a partir da compilação de informações de programas que permitem o uso da modelagem molecular.

PALAVRAS-CHAVE: ATIVIDADE BIOLÓGICA, MODELAGEM MOLECULAR, PROGRAMAS COMPUTACIONAIS

ÁREA TEMÁTICA: QUÍMICA BIOLÓGICA

FORMA DE APRESENTAÇÃO: PÔSTER