ARTIGOS COMPLETOS **77**

RESUMOS DE PESQUISA **88**

18 a 22 de outubro de 2021
Anais do ENEPE
ISSN 1677-6321

Unoeste

ARTIGOS COMPLETOS

BUSCA VIRTUAL E DOCKING DE COMPOSTOS NATURAIS PARA O COMBATE DA MALÁRIA..... 78

BUSCA VIRTUAL E DOCKING DE COMPOSTOS NATURAIS PARA O COMBATE DA MALÁRIA

Isabella Rodrigues Teixeira, Hamilton Mitsugu Ishiki.

Universidade do Oeste Paulista – UNOESTE. Presidente Prudente, SP. e-mail: hamilton@unoeste.br.

RESUMO
A malária é considerada uma doença tropical negligenciada que contamina mais de 200 milhões de pessoas ao redor do mundo, levando a óbito cerca de 400 mil pessoas, todos os anos. A resistência aos medicamentos de vetores e parasitas são dois grandes desafios para o controle da malária que requerem atenção especial. Por outro lado, a utilização de ferramentas computacionais vem auxiliando a descoberta de novos medicamentos mais eficientes e mais seguros. O uso destas ferramentas foi utilizada neste trabalho na busca por novos inibidores da enzima m1 alanilaminopeptidase, de vital importância para a propagação do parasita transmissor da malária. O uso da busca virtual (*virtual screening*) em um banco de dados de produtos naturais retornou 225 compostos semelhantes à bestatina, utilizada atualmente no tratamento da malária. Em seguida, através do *docking* molecular, os compostos foram acoplados com a enzima m1 alanilaminopeptidase e tiveram as energias de interação calculadas. Através destas energias foi possível selecionar 4 compostos que demonstraram ser potenciais inibidores da enzima e poderão ser testados no combate à malária.
Palavras-chave: m1 alanilaminopeptidase; modelagem molecular; *Plasmodium*.

VIRTUAL SCREENING AND DOCKING OF NATURAL COMPOUNDS FOR MALARIA

ABSTRACT
Malaria is considered a neglected tropical disease that infects more than 200 million people around the world, and 400,000 deaths every year. Vector and parasite drug resistance are two major challenges for malaria control that require special attention. On the other hand, the use of computational tools has been helping the discovery of new, more efficient, and safer drugs. These computational tools were used in this work to search for new inhibitors of m1 alanyl-aminopeptidase enzyme, which has vital importance for propagation of malaria. The employment of virtual screening in a natural products database returned 225 compounds like bestatin, currently used in the malaria treatment. Through molecular docking, the compounds were coupled with the enzyme m1 alanyl-aminopeptidase, and the interaction energies were calculated. Through these energies it was possible to select 4 compounds that proved to be potential inhibitors of the enzyme and could be tested in combating malaria.
Keywords: m1 alanyl-aminopeptidase; molecular modelling; *Plasmodium*.

1. INTRODUÇÃO

A malária é classificada como uma doença tropical negligenciada, transmitida por um vetor encontrado em 91 países ao redor do mundo (OMS, 2017). De mais de 120 espécies de *Plasmodium* infectando mamíferos, pássaros e répteis, apenas seis são conhecidos por infectar seres humanos regularmente, sendo que a maioria dos casos são causados por quatro espécies de protozoários do gênero (*Plasmodium falciparum, Plasmodium vivax, Plasmodium malariae* e *Plasmodium ovale*) (PHILLIPS *et al*., 2017; DAHER *et al*., 2019).

A infecção ocorre quando a fêmea do mosquito Anopheles contaminada pelos plasmódios inocula esporozoítos durante a picada no ser humano. O parasita passa por um estágio pré-eritrocítico no fígado, que dura normalmente de 1 a 2 semanas antes do início do estágio sanguíneo, onde ciclos seriais de replicação assexuada produzem o aumento no número de parasitas. Uma parte dos parasitas intra-eritrocíticos muda para o desenvolvimento sexual (JOSLING; LLINAS, 2015), produzindo fêmeas e machos

gametócitos (BOUSEMA; DRAKELEY, 2011). Ao se alimentar de sangue, um mosquito Anophele ingere os gametócitos masculinos (microgametócitos) e femininos (macrogametócitos), dando início ao ciclo esporogônico. No estômago do mosquito, os microgametas penetram nos macrogametas, produzindo os zigotos. Os zigotos tornam-se móveis e alongados, evoluindo para oocinetes. Os oocinetes invadem a parede do intestino médio do mosquito, onde se desenvolvem em oocistos. Estes oocistos crescem, rompem-se e liberam esporozoítos, os quais se deslocam para as glândulas salivares do mosquito. A inoculação dos esporozoítos em um novo hospedeiro humano perpetua o ciclo de vida da malária (ASHLEY; PYAE PHYO; WOODROW, 2018).

Os fármacos antimaláricos podem ser classificados de acordo com a sua estrutura química e atividade antiplasmódica no ciclo de vida da malária (ALVEN; ADERIBIGBE, 2019): gametocida, profilaxia, esquizonticidas sanguíneos, esquizonticidas de tecidos e esporontocidas.

Os gametocitocidas são administrados para inibir a transferência da malária de uma pessoa infectada para o mosquito Anopheles fêmea não infectado. Os gametocitocidas destroem as formas sexuadas do parasita, ou seja, destroem os gametócitos femininos e masculinos com o objetivo de interromper a transmissão da infecção ao vetor. Alguns exemplos de gametocitocidas incluem a artemisinina e a cloroquina [DOW; MAGILL; OHRT, 2008; MOHAMMADI *et al*., 2020]. Os profilático bioativos antimaláricos são administrados para a prevenção de infecções por malária em pessoas que estão viajando de países sem malária para países onde a malária é endêmica, especialmente viajantes com baixa função imune. As drogas profiláticas incluem pirimetamina, proguanil e primaquina [DOUGLAS *et al*., 2017].

Os esquizonticidas de sangue são utilizados para interromper as formas eritrocitárias assexuadas dos parasitas *Plasmodium* responsável pelos sintomas clínicos da doença. Estes podem originar uma cura clínica ou supressão da infecção, mas como não têm efeito sobre as formas exo-eritrocíticas, o tratamento não resulta em uma cura total de malária provocada por *P. ovale* ou *P. vivax*. Alguns exemplos de esquizonticidas sanguíneos incluem halofantrina, sulfadoxina, mefloquina e quinina (ALVEN; ADERIBIGBE, 2019). Os esquizonticidas de tecido atuam na fase exo-eritrocítica do parasita e são empregados para prevenir a recidiva dos parasitas *P. ovale* e *P. vivax* causada por hipnozoítos no estágio hepático do ciclo de vida do plasmódio. A pirimetamina e a primaquina são exemplos de esquizonticidas de tecidos [FONTINHA; MOULES; PRUDÊNCIO, 2020]. E, por fim existem os esporontocidas que são medicamentos antimaláricos que inibem o desenvolvimento de oócitos nos parasitas no estágio de mosquito, inibindo assim a transmissão da doença. As drogas esporontocidas incluem a primaquina e pirimetamina (ALVEN; ADERIBIGBE, 2019).

Em todo o mundo, o artesunato intravenoso é o tratamento de primeira linha para a malária grave causada por qualquer espécie de Plasmodium (PLEWES *et al*., 2019). Ensaios clínicos randomizados mostraram que o artesunato intravenoso é superior à quinina intravenosa, reduzindo a mortalidade em adultos em 35%, no Sudeste asiáticos, e em crianças em 22%, na África (DONDORP *et al*., 2005; DONDORP *et al*., 2010). Na ausência do artesunato, pode-se iniciar o tratamento com a quinina, que possui mais efeitos adversos, incluindo hipoglicemia, hiperinsulinemia, cardiotoxicidade e hipotensão, particularmente se administrada como uma injeção rápida em vez de infusão (OMS, 2014).

Após um período mínimo de 24 horas do início do tratamento antimalárico intravenoso e quando a medicação oral pode ser tolerada, o tratamento deve ser concluído com uma terapia combinada de artemisinina oral. Uma outra opção é o tratamento com a mefloquina, que não deve ser administrada se houver comprometimento da consciência devido ao aumento do risco de complicações neuropsiquiátricas. Em viajantes que retornam, a medicação anti-malária de continuação deve ser diferente de qualquer medicamento profilático usado durante a viagem. Na malária vivax grave, um tratamento com primaquina também deve ser realizado após a recuperação (PLEWES *et al*., 2019).

A maior razão para a grande mortalidade causada pelas infecções da malária ao redor do mundo se deve à resistência aos medicamentos (FAROOQ; MAHAJAN, 2004). Estudos demonstram que no período de 2007 a 2012 foram desenvolvidos apenas 7 novos medicamentos contra a malária (ANDRADE, KUMMERLE, GUIDO, 2018). Deste modo, faz-se necessário a procura por novas drogas ou novos alvos moleculares capazes de combater esta doença. Uma das alternativas é a utilização da Modelagem Molecular (MM).

A MM compreende um número de ferramentas e métodos computacionais que tem como objetivo entender e prever o comportamento de sistemas reais; usando para descrever e prever estruturas moleculares, propriedades do estado de transição e equilíbrio de reações, propriedades termodinâmicas,

entre outras (COHEN, *et al*., 1990; ALDEGHI, BLUCK, BIGGIN, 2018). As técnicas de MM auxiliam no desenvolvimento de novas drogas utilizando basicamente duas abordagens diferentes, o projeto de fármaco baseado em ligante (Ligand Based Drug Design - LBDD) (BASKIN, 2020) e o projeto de fármaco baseado em estrutura (Structure Based Drug Design - SBDD) (WANG *et al*., 2018).

Os métodos de SBDD se baseiam no conhecimento do arranjo topológico de alvos biológicos, logo, utilizam como pré-requisito dados tridimensionais detalhados da macromolécula em estudo. Essa informação pode ser obtida mediante a análise de estruturas cristalográficas, de RMN ou de modelagem por homologia. A ancoragem molecular (Docking) é uma das principais estratégias de SBDD, que consiste na predição da conformação bioativa de uma pequena molécula (ligante) no sítio de ligação de uma macromolécula (proteína-alvo), seguido da avaliação (pontuação) e classificação do modo de ligação proposto (TORRES *et al.*, 2019).

Como exemplo de sucesso de técnicas utilizando a modelagem molecular pode-se citar os estudos realizados com a indústria farmacêutica Pharmacia, parte da Pfizer, na busca de inibidores da tirosina fosfatase-1B, relacionada à diabetes. Através de ferramentas computacionais os pesquisadores selecionaram 365 compostos, dos quais 127 apresentaram uma inibição efetiva. Simultaneamente, este mesmo grupo realizou um estudo de HTS (high-throughput screening) com 400.000 compostos, sendo que 81 apresentaram uma inibição efetiva com o mesmo alvo. A diferença de 35% de sucesso utilizando as ferramentas computacionais contra 0,021% utilizando a pesquisa convencional indicam o grande poder e sucesso do primeiro método (SLIWOSKI *et al*., 2013).

Considerando a grande quantidade de pessoas que são afetadas pela malária ao redor do mundo todos os anos, e a necessidade de se descobrir novas drogas para o seu combate, este trabalho tem como objetivos: i) realizar uma busca virtual no banco de dados do Sistemat-X, formado por compostos naturais, por compostos que sejam estruturalmente semelhantes à bestatina, utilizada atualmente para o tratamento da malária; e ii) realizar os estudos de ancoragem (*docking*) entre os compostos encontrados (ligantes) e a enzima m1 alanilaminopeptidase a fim de se calcular as respectivas afinidades e as conformações de ligação.

2. MATERIAIS E MÉTODOS

A primeira etapa do trabalho consistiu em realizar uma procura por compostos análogos a bestatina, utilizada como medicamento antimalárico, em um banco de dados de produtos naturais de livre acesso. A bestatina foi escolhida considerando que é a única molécula que possui dados de cristalografia de raio-X complexada com a enzima que pretendemos estudar. O banco de dados selecionado foi o Sistemat-X que possuí mais de 3000 sesquiterpenos lactonizados da família *Asteraceae* e alcalóides de *Apocynaceae* (SCOTTI *et al*., 2018). Como molde foi utilizado apenas um fragmento da bestatina, figura 1, sendo que esta escolha foi realizada de modo a supor que os compostos análogos encontrados devam atuar no mesmo sítio ativo da bestatina. Os compostos selecionados nesta etapa foram submetidos à otimização das geometrias através do método semiempírico AM1 (DEWAR *et al*., 1985) e tiveram as suas cargas calculadas. As moléculas podem adotar várias conformações, com energias diferentes e a possibilidade do estudo das conformações e propriedades de uma molécula isolada permite predizer as conformações preferenciais (BARREIRO *et al*., 1997). Considerando que as interações entre o ligante e a proteína são dependentes da geometria do ligante, utiliza-se a geometria de mínima energia. As geometrias moleculares de mínima energia, ou seja, a mais estável, se aproximam muito da geometria encontrada nas estruturas obtidas experimentalmente através da cristalografia de raio-X (KELLYA, TUSZYNSKI, KLOBUKOWSKI, 2011; SARAVANAN *et al*., 2015).

A estrutura do sítio receptor, ou seja, da enzima m1 alanilaminopeptidase foi utilizada para definir o farmacóforo para a triagem virtual dos compostos obtidos no banco de dados e, para realizar os estudos de *docking*. A estrutura da enzima m1 alanilaminopeptidase (Código PDB: 3EBH), obtida com uma resolução de 1,65Å, foi utilizada como alvo para os compostos selecionados no banco de dados (MISTRY *et al*., 2014).

O procedimento de refinamento da enzima foi realizado por adição de átomos ausentes aos resíduos, adição de átomos de hidrogênio polares e das cargas de Kollman, remoção de moléculas de água cristalográficas e ligantes e íons externos e irrelevantes. A energia de ligação mais elevada (mais negativa) obtida para um composto e a enzima foi considerada como a afinidade de ligação máxima.

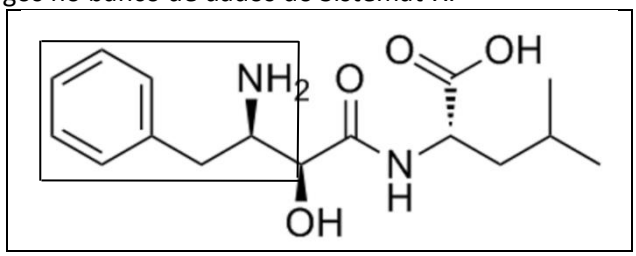
Os cálculos de *docking* entre os ligantes encontrados no banco de dados e a enzima m1 alanilaminopeptidase foram realizados com o emprego do programa iGEMDOCK (HSU *et al*., 2011). O iGEMDOCK é uma ferramenta integrada que cria um ambiente de seleção virtual a partir de preparações realizadas através de uma análise pós-triagem utilizando-se de interações farmacológicas (YANG; CHEN, 2004).

Primeiramente o programa fornece interfaces interativas para preparar o local de ligação da proteína alvo e a biblioteca de ligantes. Em seguida, cada ligante do banco de dados é ancorado no sítio ativo usando a ferramenta de acoplamento iGEMDOCK. Posteriormente, o iGEMDOCK gera perfis de interação proteína-ligante, essas interações são de caráter: eletrostáticas, de ligação de hidrogênio e de van der Waals. Com base nesses perfis e estruturas dos ligantes, o iGEMDOCK infere as interações farmacológicas e agrupa os ligantes para a análise pós-triagem. Finalmente, o iGEMDOCK classifica e visualiza os ligantes combinando as interações farmacológicas e a função de pontuação (score), baseada em energia do iGEMDOCK (Hsu *et al*., 2011).

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Ao se realizar a busca por compostos de origem natural no banco de dados do Sistemat-X, foram encontradas 225 moléculas, que apresentaram uma parte de suas estruturas semelhantes à da bestatina, indicada na Figura 1. Todos os 225 compostos foram submetidos inicialmente a uma otimização da geometria através do método semiempírico AM1, para a obtenção da geometria de mínima energia, e tiveram as suas cargas atômicas calculadas.

Figura 1. Fórmula estrutural da Bestatina. Em destaque encontra-se o fragmento utilizado para realizar a busca por compostos análogos no banco de dados do Sistemat-X.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2021. ACD/ChemSketch.

Em seguida, os compostos foram submetidos ao estudo de *docking* molecular, que foi utilizado para prever os modos de interação entre a enzima e os ligantes, calcular os valores das energias de interação entre ambos e realizar um ranking de pontuação com base nas energias calculadas. Os cálculos de energia livre de interação proteína-ligante baseados em simulações moleculares fornecem estimativas das afinidades de ligação de compostos propostos como candidatos a drogas para uma proteína alvo [DE RUITER; OOSTENBRINK, 2020].

Nesta etapa, cada um dos compostos foi adicionado dentro da proteína para se determinar o sítio de ligação e o valor da energia de ligação. O programa iGemdock foi utilizado para predizer o melhor sítio ativo, para que as interações entre o ligante e a proteína fossem as mais favoráveis possíveis. Dentre os 15 melhores resultados, ou seja, os que apresentaram as melhores energias de interação entre os compostos encontrados e a enzima (valores mais negativos), foi verificado que apenas quatro compostos atuam no mesmo sítio ativo da bestatina. Considerando que os compostos obtidos na literatura possuem uma certa semelhança estrutural com a bestatina, seria esperado que todos eles fossem interagir no mesmo sítio ativo.

O *re-dock* da bestatina, ou seja, o *docking* realizado entre a enzima m1 alanilaminopeptidase e a própria bestatina, resultou em uma energia de -100,42 kcal/mol, Tabela 1.

Tabela 1. Valores das energias de interação obtidas para os compostos e a enzima m1 alanilaminopeptidase, calculadas através do programa iGemdock.

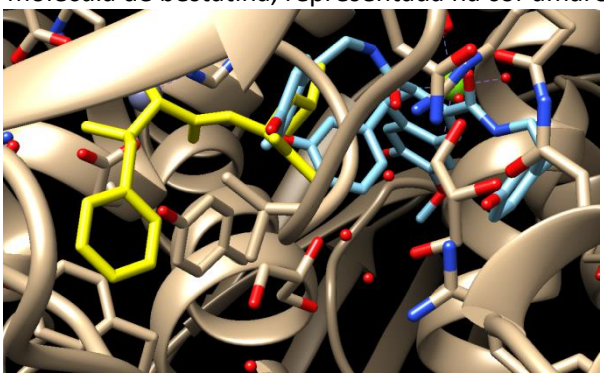
	Energia (kcal/mol)			
Composto	total	van der Waals	ligação H	Eletrostática
159	-161,94	-124,05	-37,89	0
132*	-142,36	-121,60	-20,76	0
189*	-120,67	-89,80	-30,87	0
23*	-119,88	-103,05	-16,83	0
27*	-117,86	-93,86	-24,00	0
156*	-116,68	-90,73	-25,95	0
90	-116,15	-113,69	-2,47	0
22	-115,97	-87,89	-28,08	0
23	-115,95	-96,23	-19,72	0
54*	-115,12	-98,95	-13,63	-2,55
192*	-114,98	-103,70	-11,28	0
158*	-114,68	-88,61	-26,07	0
142*	-114,22	-109,90	-4,32	0
23*	-114,20	-93,38	-20,82	0
141*	-113,47	-113,47	0	0

Fonte: Elaborado pelo autor, 2021. Os compostos indicados por * se ligaram em sítios diferentes ao relatado para a bestatina.

Esta etapa é realizada para verificar se o programa utilizado para realizar o docking molecular pode reproduzir os dados experimentais e, deste modo, realizar um acoplamento correto com os compostos em estudo. O resultado esperado é de que a posição obtida através dos cálculos seja idêntica a posição do cristal, obtido experimentalmente, podendo apresentar um desvio (RMSD = *root mean square deviation*) de até 2 a 3 Å (Angstrons) (YANG; CHEN, 2004). Em nosso estudo foi constatado um RMSD=0,59, indicando que os compostos análogos a este ligante podem ser estudados através deste programa (SCHMID *et al.*, 2016). Os valores para os 15 melhores resultados encontrados variaram entre -161,94 kcal/mol e -113,14 kcal/mol, Tabela 1.

A Figura 2 ilustra a interação que ocorre entre a bestatina, em amarelo, e o seu sítio de ligação. Ilustra também a interação que ocorre entre o composto 159, em azul, e o seu sítio de ligação. Os dois compostos foram adicionados na mesma figura com o intuito de se visualizar e poder comparar a localização dos compostos no sítio ativo.

Figura 2. Resultado do docking molecular para o composto 159, representado na cor azul. Para fins ilustrativos e comparativos a molécula de bestatina, representada na cor amarela, também foi inserida.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2021. Chimera 1.14.

Como pode ser observado na Figura 2, apenas o fragmento do lado do ácido carboxílico está sobreposto a uma pequena porção do composto 159, a parte com um dos anéis fenólicos. Esta região é denominada de fenda S1´ da proteína, e possui caráter hidrofóbico (GREMBECKA *et al.*, 2003), o que justifica o posicionamento do anel aromático na região.

Através dos dados de cristalografia de raio-X da bestatina complexada com a m1 alanilaminopeptidase foi verificado que o Glu319 se estende para a posição do sítio ativo, onde forma uma interação do tipo ligação de hidrogênio com o átomo de N do grupo amino (NH_2) da bestatina. A bestatina também forma uma ligação de hidrogênio com a amida da cadeia principal de Ala461 (McGOWAN *et al*., 2009). Os resultados dos cálculos não indicaram nenhuma interação ocorrendo através de ligações de hidrogênio com a Glu319. A única interação realizada através de ligações de hidrogênio, sem ser a da bestatina, ocorre com o composto 159 e a Ala461, Tabela 2. Esta interação é mais forte do que a que foi verificada para a bestatina.

O fragmento da bestatina que se assemelha à fenilalanina é amortecido por interações hidrofóbicas através dos fragmentos de Gln317, Met462, Tyr575 e Met1034. No total, a bestatina faz 8 ligações de hidrogênio e 7 interações hidrofóbicas com o sítio ativo (McGOWAN *et al.*, 2009). Considerando que os compostos estudados não se sobrepõem perfeitamente à bestatina, é esperado que as interações não ocorram exatamente com os mesmos aminoácidos da enzima, apenas com os aminoácidos que estão na mesma região de sobreposição. Com os fragmentos da Ala461 e Met462 a bestatina é a que possui as melhores interações de ligação de hidrogênio, mas com os fragmentos da Thr492, Thr493 e Val493 as interações são mais fracas.

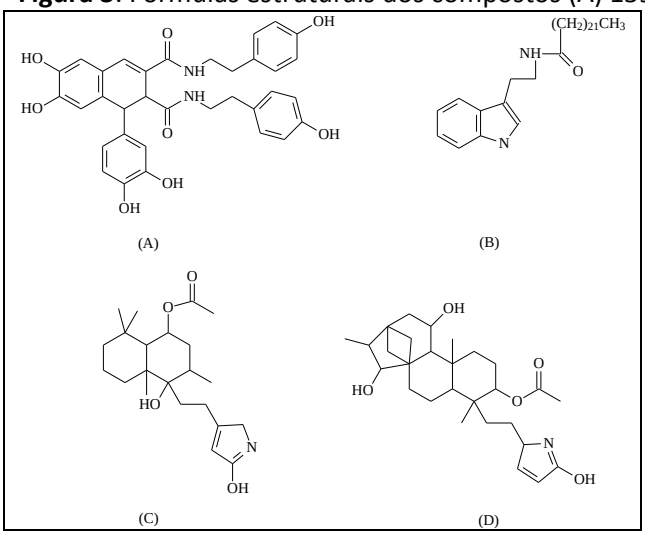
Velmourougane *et al*. (2011) ao realizar estudos de cristalografia de raio-X da bestatina determinaram ligações de hidrogênio ocorrendo entre Glu319 e Glu463 com o átomo de nitrogênio do grupo amino; entre Gly460 e Ala461 com o átomo de oxigênio do grupo carboxílico da bestatina e entre Tyr580 e o átomo de oxigênio da amida. Os resultados de *re-dock* da bestatina foram coincidentes apenas em relação as interações que ocorrem com Ala461 e Glu463, porém indicou a existência de interação de hidrogênio entre Glu497 e Glu519, não determinadas experimentalmente. As interações hidrofóbicas determinadas na cristalografia de raio-X ocorrem com fragmentos dos seguintes aminoácidos: Thr492, Val493, Val523, Gln317, Val459, Met462, Glu572, Tyr575 e Met1034 (VELMOUROUGANE *et al*. 2011). Os resultados do *dock* indicam que vários destes fragmentos são responsáveis pelas interações hidrofóbicas que ocorrem entre os compostos 159, 90, 22 e 23, Figura 3, que apresentaram as melhores energias e estão interagindo no mesmo sítio da bestatina. Como pode ser observado na Tabela 2, as energias de interação são geralmente melhores do que as calculadas para a bestatina. Estas energias melhores, mais negativas, representam uma maior interação entre os compostos e a enzima, indicando a possibilidade de uma maior inibição.

Tabela 2. Energias de interação, em kcal/mol, entre os compostos que apresentaram as melhores interações e se ligam no mesmo sítio ativo da bestatina, e fragmentos de aminoácidos da enzima m1 alanilaminopeptidase, calculadas através do programa iGEMDOCK.

	Besta-tina	159	90	22	23
HM Ala461	-3,4	-4,9	0,0	0,0	0,0
HS Glu463	-4,8	0,0	0,0	0,0	0,0
HS Glu497	-3,5	0,0	0,0	0,0	0,0
HS Glu 519	-3,5	0,0	0,0	0,0	0,0
VS Glu319	-8,0	0,0	-4,6	-0,6	-1,2
VM Val459	-3,7	-1,0	-6,8	-4,5	-8,3
VS Val459	-3,7	-1,5	-6,8	-4,5	-8,3
VM Ala461	-5,3	-3,7	-2,3	-5,7	-4,4
VS Met462	-4,2	0,0	-1,3	-0,2	-2,1
VM Thr492	-0,8	-3,8	-2,9	-4,5	-4,0
VS Thr492	-0,4	-4,8	-3,8	-2,4	-3,7
VM Val493	-1,6	-4,6	-2,3	-4,1	-3,9
VS Val493	-2,6	-5,2	-2,9	-3,5	-3,1

Fonte: Elaborado pelo autor, 2021. HM indica ligação de hidrogênio com a cadeia principal, HS indica ligação de hidrogênio com a cadeia lateral, VM indica interação de van der Waals com a cadeia principal e VS indica interação de van der Waals com a cadeia lateral.

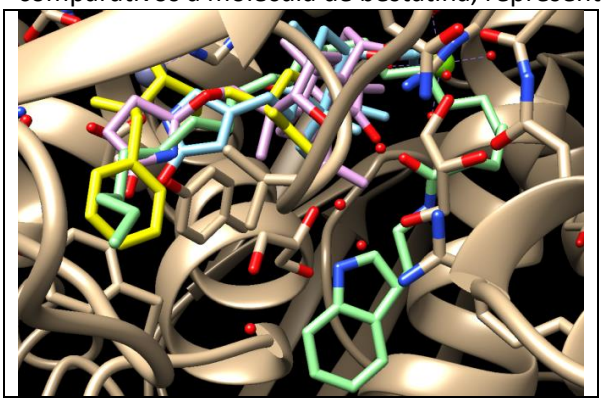
Figura 3. Fórmulas estruturais dos compostos (A) 159, (B) 90, (C) 22 e (D) 23.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2021. ACD/ChemSketch.

Como pode ser observado através da Figura 4, os compostos 90, 22 e 23 se sobrepõem mais à estrutura da bestatina, em comparação com o composto 159. Em nenhum destes três compostos foi verificada a existência de interações de ligação de hidrogênio com os fragmentos de aminoácidos que interagem com a bestatina.

Figura 4. Resultados do *docking* molecular para: o composto 90, representado na cor verde, composto 22, representado na cor purpura e o composto 23, representado na cor azul. Para fins ilustrativos e comparativos a molécula de bestatina, representada na cor amarela, também foi inserida.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2021. Chimera 1.14.

O composto 90 possui a cadeia carbônica sobreposta à bestatina, os compostos 22 e 23 possuí o anel do pirrol sobreposto à bestatina. Estes três compostos interagem fortemente tanto com os fragmentos da cadeia principal, bem como os fragmentos da cadeia secundária da Val459. As interações destes três compostos são muito semelhantes à do compostos 159.

4. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Através da busca virtual em um banco de dados de produtos naturais e os cálculos de docking molecular foi possível obter 15 compostos que demonstram possuir uma alta afinidade com a enzima m1 alanilaminopeptidase. Considerando que foi utilizado o fragmento da bestatina para a busca virtual, seria esperado que todos os compostos atuassem no mesmo sítio ativo da bestatina, o que foi verificado para apenas 4 compostos. Quando comparados com a bestatina, utilizada como medicamento, a energia de ligação destes 4 compostos foi superior, indicando boas interações com a proteína, sugerindo deste modo que podem atuar como potenciais ligantes da m1 alanilaminopeptidase. A continuidade em ensaios *in vitro* e *ex vivo* poderão confirmar os resultados teóricos e devem auxiliar no combate da malária.

REFERÊNCIAS

ALDEGHI, M.; BLUCK, J.P.; BIGGIN, P.C. Absolute alchemical free energy calculations for ligand binding: A beginner's guide. **Methods in Molecular Biology**, v. 1762, p. 199–232, 2018. https://doi.org/10.1007/978-1-4939-7756-7_11

ALVEN, S.; ADERIBIGBE, B. Combination Therapy Strategies for the Treatment of Malaria. **Molecules**. v. 24, n. 19, p. 3601, 2019. https://doi.org/10.3390/molecules24193601

ANDRADE, C.H.; KUMMERLE, A.E.; GUIDO, R.V.C. Perspectivasda química medicinal para o século XXI: Desafios e oportunidades. **Química Nova**, v. 41, n. 4, p. 476-483, 2018. https://doi.org/10.21577/0100-4042.20170182

ASHLEY, E.A.; PYAE PHYO, A.; WOODROW, C.J. Malaria. **The Lancet**, v. 391, n. 10130, p. 1608–1621, 2018. https://doi.org/10.1016/S0140-6736(18)30324-6

BARREIRO, E.J.; RODRIGUES, C.R.; ALBUQUERQUE, M.G.; SANT´ANNA, C.M.R.; ALENCASTRO, R.B. Modelagem Molecular: Uma Ferramenta para o Planejamento Racional de Fármacos em Química Medicinal. **Química Nova**, v. 20, n. 3, p. 1-11, 1997. https://doi.org/10.1590/S0100-40421997000300011

BASKIN, I.I. The power of deep learning to ligand-based novel drug discovery. **Expert Opinion Drug Discovery**, v. 15, n. 7, p. 755-764, 2020. https://doi.org/10.1080/17460441.2020.1745183

BOUSEMA, T.; DRAKELEY C. Epidemiology and infectivity of Plasmodium falciparum and Plasmodium vivax gametocytes in relation to malaria control and elimination. **Clinical Microbiology Reviews**, v. 24, n. 2, p. 377-410, 2011. https://doi.org/10.1128/CMR.00051-10

COHEN, N.C.; BLANEY, J.M.; HUMBLET, C.; GUND, P.; BARRY, D.C. Molecular modeling software and methods for medicinal chemistry. **Journal of Medicinal Chemistry**, v. 33, n.3, p. 883-894, 1990. https://doi.org/10.1021/jm00165a001

DAHER, A.; SILVA, J.C.A.L.; STEVENS, A.; MARCHESINI, P.; FONTES, C.J.; TER KUILE, F.O.; LALLO, D.G. Evaluation of Plasmodium vivax malaria recurrence in Brazil. **Malaria Journal**, v. 18, n. 1, p. 18, 2019. https://doi.org/10.1186/s12936-019-2644-y

DE RUITER, A.; OOSTENBRINK, C. Advances in the calculation of binding free energies. **Current Opinion in Structure Biology**, v. 61, p. 207-212, 2020. https://doi.org/10.1016/j.sbi.2020.01.016

DEWAR, M.J.S.; ZOEBISCH, E.G.; HEALY, E.F.; STEWART, J.J.P. Development and use of quantum mechanical molecular models. 76. AM1: A new general purpose quantum mechanical molecular model. **Journal of the American Chemical Society**, v. 107, n. 13, p. 3902-3909, 1985. https://doi.org/10.1021/ja00299a024

DONDORP, A.; NOSTEN, F.; STEPNIEWSKA, K.; DAY, N.; SOUTH EAST ASIAN QUININE ARTESUNATE MALARIA TRIAL (SEAQUAMAT) GROUP. Artesunate versus quinine for treatment of severe falciparum malaria: a randomised trial. **Lancet**, v. 366, n. 9487, p. 717-725, 2005.

DONDORP, A.M.; FANELLO, C.I.; HENDRIKSEN, I.C.; *et al*. Artesunate versus quinine in the treatment of severe falciparum malaria in African children (AQUAMAT): an open label, randomised trial. **Lancet**, v. 376, n. 9753, p. 1647-1657, 2010. https://doi.org/10.1016/S0140-6736(05)67176-0

DOUGLAS, N.M.; POESPOPRODJO, J.R.; PATRIANI, D.; MALLOY, M.J.; KENANGALEM, E.; SUGIARTO, P.; SIMPSON, J.A.; SOENARTI, Y.; ANSTEY, N.M.; PRICE, R.N. Unsupervised primaquine for the treatment of Plasmodium vivax malaria relapses in southern Papua: A hospital-based cohort study. **PLoS Medicine**. v. 14, n. 8, e1002379, 2017. https://doi.org/10.1371/journal.pmed.1002379

DOW, G.S.; MAGILL, A.J.; OHRT, C. Clinical development of new prophylactic antimalarial drugs after the 5th Amendment to the Declaration of Helsinki. **Therapeutics and Clinical Risk Management**, v. 4, n. 4, p. 803-819, 2008. https://doi.org/10.2147/TCRM.S1025

FAROOQ, U.; MAHAJAN, R.C. Drug resistance in malaria. **Journal of Vector Borne Diseases**. v. 41, n. 3-4, p. 45-53, 2004.

FONTINHA, D.; MOULES, I.; PRUDÊNCIO, M. Repurposing Drugs to Fight Hepatic Malaria Parasites. **Molecules**. v. 25, n. 15, p. 3409, 2020. https://doi.org/10.3390/molecules25153409

GREMBECKA, J.; MUCHA, A.; CIERPICKI, T.; KAFARSKI, P. The most potent organophosphorus inhibitors of leucine aminopeptidase. Structure-based design, chemistry, and activity. **Journal of Medicinal Chemistry**. v. 46, n. 13, p. 2641-2655, 2003. https://doi.org/10.1021/jm030795v

HSU, K.C.; CHEN, Y.F.; LIN, S.R.; YANG, J.M. iGEMDOCK: a graphical environment of enhancing GEMDOCK using pharmacological interactions and post-screening analysis. **BMC Bioinformatics**, v. 12, n. Suppl 1, S33, 2011. https://doi.org/10.1186/1471-2105-12-S1-S33

JOSLING, G.A.; LLINAS M. Sexual development in Plasmodium parasites: knowing when it's time to commit. **Nature Reviews. Microbiology**. v. 13, n. 9, p. 573-587, 2015. https://doi.org/10.1038/nrmicro3519

KELLYA, E.B; TUSZYNSKI, J.A.; KLOBUKOWSKI, M. QM and QM/MD simulations of the Vinca alkaloids docked to tubulin. **Journal of Molecular Graphics & Modelling**. v. 30, p. 54-66, 2011. https://doi.org/10.1016/j.jmgm.2011.06.005

McGOWAN, S.; PORTER, C.J.; LOWTHER, J.; STACK, C.M.; GOLDING, S.J.; SKINNER-ADAMS, T.S.; TRENHOLME, K.R.; TEUSCHER, F.; DONNELLY, S.M.; GREMBECKA, J.; MUCHA, A.; KAFARSKI, P.; DEGORI, R.; BUCKLE, A.M.; GARDINER, D.L.; WHISSTOCK, J.C.; DALTON, J.P. Structural basis for the inhibition of the essential Plasmodium falciparum M1 neutral aminopeptidase. **Proceedings of the National Academy of Science of the USA**. v. 106, n. 8, p. 2537-42, 2009. https://doi.org/10.1073/pnas.0807398106

MISTRY, S.N.; DRINKWATER, N.; RUGGERI, C.; SIVARAMAN, K.K.; LOGANATHAN, S.; FLETCHER, S.; DRAG, M.; PAIARDINI, A.; AVERY, V.M.; SCAMMELLS, P.J.; MCGOWAN, S. Two-Pronged Attack: Dual Inhibition of Plasmodium falciparum M1 and M17 Metalloaminopeptidases by a Novel Series of Hydroxamic Acid-Based Inhibitors. **Journal of Medicinal Chemistry**. v. 57, n. 21, p. 9168-9183, 2014. https://doi.org/10.1021/jm501323a

MOHAMMADI, S.; JAFARI, B.; ASGHARIAN, P.; MARTORELL, M.; SHARIFI-RAD, J. Medicinal plants used in the treatment of Malaria: A key emphasis to Artemisia, Cinchona, Cryptolepis, and Tabebuia genera. **Phytotherapy Research**. v. 34, n. 7, p. 1556-1569, 2020. https://doi.org/10.1002/ptr.6628

OMS - Organização mundial da Saúde (WHO). Severe malaria. **Tropical Medicine & International Health**, v. 19, Suppl 1, p. 7–131, 2014. https://doi.org/10.1111/tmi.12313_2

OMS – Organização mundial da Saúde (WHO). **World malaria report 2017**. Geneva: World Health Organization, 2017. https://doi.org/10.1038/nrdp.2017.50

PHILLIPS, M.A.; BURROWS, J.N.; MANYANDO, C.; VAN HUIJSDUIJNEN, R.H.; VAN VOORHIS, W.C.; WELLS, T.N.C. Malaria. **Nature Reviews Disease Primers**. v. 3, p. 17050, 2017. https://doi.org/10.1038/nrdp.2017.50

PLEWES, K.; LEOPOLD, S.J.; KINGSTON, H.W.F.; DONDORP, A.M. Malaria: What's New in the Management of Malaria? **Infectius Dissease of Clinical North America**, v. 33, n. 1, p. 39-60, 2019. https://doi.org/10.1016/j.idc.2018.10.002

SARAVANAN, R.R.; SESHADRI, S.; GUNASEKARAN, S.; MENDOZA-MEROÑO, R.; GARCIA-GRANDA, S. Conformational analysis, X-ray crystallographic, FT-IR, FT-Raman, DFT, MEP and molecular docking studies on 1-(1-(3-methoxyphenyl) ethylidene) thiosemicarbazide. **Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy**, v. 139, p. 321–328, 2015. https://doi.org/10.1016/j.saa.2014.12.026

SCHMID, N.; EICHENBERGER, A. P.; CHOUTKO, A.; RINIKER, S.; WINGER, M.; MARK, A. E. & VAN GUNSTEREN, W. F. Definition and testing of the GROMOS force-fieldversions 54A7 and 54B7. **European biophysics journal**, v. 40, n. 7, p. 843, 2016. https://doi.org/10.1007/s00249-011-0700-9

SCOTTI, M.T.; HERRERA-ACEVEDO, C.; OLIVEIRA, T.B.; COSTA, R.P.O.; SANTOS, S.Y.K.O.; RODRIGUES, R.P.; SCOTTI, L.; DA-COSTA, F.B. Sistemat-X, an Online Web-Based Cheminformatics Tool for Data Management of Secondary Metabolites. **Molecules,** v. 23, n. 1, p. 103, 2018. https://doi.org/10.3390/molecules23010103

SLIWOSKI, G.; KOTHIWALE, S.; MEILER, J.; LOWE, E.W. Jr. Computational methods in drug discovery. **Pharmacological Reviews**. v. 66, n. 1, p. 334-395, 2013. https://doi.org/10.1124/pr.112.007336

TORRES, P.H.M.; SODERO, A.C.R.; JOFILY, P.; SILVA-Jr, F.P. Key Topics in Molecular Docking for Drug Design. **International Journal of Molecular Science**. v. 20, n. 18, p. 4574-4603, 2019. https://doi.org/10.3390/ijms20184574

VELMOUROUGANE, G.; HARBUT, M.B.; DALAL, S.; MCGOWAN, S.; OELLIG, C.A.; MEINHARDT, N.; WHISSTOCK, J.C.; KLEMBA, M.; GREENBAUM, D.C. Synthesis of new (-)-bestatin-based inhibitor libraries reveals a novel binding mode in the S1 pocket of the essential malaria M1 metalloaminopeptidase. **Journal of Medicinal Chemistry**. v. 54, n. 6, 1655-1666, 2011. https://doi.org/10.1021/jm101227t

WANG, X.; SONG, K.; LI, L.; CHEN, L. Structure-Based Drug Design Strategies and Challenges. **Current Topics in Medicinal Chemistry**. v. 18, n. 12, p. 998-1006, 2018. https://doi.org/10.2174/1568026618666180813152921

YANG, J.M; CHEN, C.C. GEMDOCK: A generic evolutionary method for molecular docking. **Proteins: Structure, Function and Bioinformatics**, v. 55, n. 2, p. 288-304, 2004. https://doi.org/10.1002/prot.20035

RESUMOS DE PESQUISA

ANÁLISE FÍSICO-QUÍMICA DO SAL MARINHO E DO SAL DO HIMALAIA..... 89

AVALIAÇÃO DA PRESENÇA DE METAIS POTENCIALMENTE TÓXICOS EM LODO DE ESGOTO PROVENIENTE DE UMA ESTAÇÃO DE TRATAMENTO 90

AVALIAÇÃO DA PRESENÇA DE METAIS POTENCIALMENTE TÓXICOS NA REPRESA CICA DE PRESIDENTE PRUDENTE-SP 91

BIOATIVOS EM PLANTAS DE ALOE VERA 92

COMPLEXOS HETEROBIMETÁLICOS DE RU(II) E NI(II) COMO CATALISADORES PARA POLIMERIZAÇÃO VIA METÁTESE POR ABERTURA DE ANEL..... 93

DESENVOLVIMENTO DE UM SENSOR QUIMIOCAPACITOR BASEADO EM POLÍMERO CONDUTOR MOLECULARMENTE IMPRESSO PARA DETECÇÃO DE CITOSINA 94

DETERMINAÇÃO DA CONCENTRAÇÃO DE CHUMBO TOTAL EM ANÉIS CONCÊNTRICOS DE ÁRVORES SOBRE ÁREAS DE FALHA NEOTECTÔNICA 95

DETERMINAÇÃO DE METAIS NO LEITE 96

DETERMINAÇÃO DE METAIS TOXICOS E FURFURAL EM BEBIDAS ALCOOLICAS 97

ESTUDO METODOLOGICO NO DESENVOLVIMENTO DE UM SENSOR ELETROQUÍMICO BASEADO EM AZO-POLÍMERO MOLECULARMENTE IMPRESSO PARA DETECÇÃO DE CAFEÍNA NA INVESTIGAÇÃO FORENSE 98

IDENTIFICAÇÃO DOS TERPENOS DO ÓLEO ESSENCIAL DE MENTRUZ CULTIVADOS EM PRESIDENTE PRUDENTE 99

LICOR DE PITAYA: AVALIAÇÃO FÍSICO-QUÍMICA E BIOQUÍMICA 100

PADRÃO DE IDENTIDADE E QUALIDADE DE VINAGRES..... 101

PROCURA IN SILICO POR NOVOS MEDICAMENTOS PARA O COMBATE DA ESQUIZOFRENIA..... 102

SELEÇÃO IN SILICO DE NOVOS INIBIDORES PARA O COMBATE DO ADENOCARCINOMA DE CÓLON RESISTENTE..... 103

SINTESES DE ANÁLOGOS, PARTINDO DE UM COMPLEXO DE PLATINA COM UTILIZAÇÃO FARMACOLÓGICA. 104

USO DE AGUAPÉ COMO PLANTA FITORREMEDIADORA DO HERBICIDA AMETRINA EM EFLUENTE SINTÉTICO 105

Pesquisa (ENAPI)

Comunicação oral on-line

UNIVERSIDADE DO OESTE PAULISTA - UNOESTE
Ciências Exatas e da Terra
Química

ANÁLISE FÍSICO-QUÍMICA DO SAL MARINHO E DO SAL DO HIMALAIA

HELLEN KARINE BELARDINUCCI MAFRA
NATHALIA DE OLIVEIRA TADEI
VINICIUS MARQUES GOMES
JAQUELINE NASCIMENTO DA SILVA
DANIEL ÂNGELO MACENA

O sal do himalaia, vem sendo muito utilizado nos últimos anos, por causa de seus prováveis benefícios para a saúde em relação ao sal de cozinha, e muitas vezes é estimulado a troca do sal comum pelo sal rosa. Dessa forma, o presente trabalho possuiu o objetivo de comparar os sais de cozinha comum encontrados no mercado (refinado e grosso) com o sal rosa do Himalaia (fino e grosso) por meio de análises físico-químicas, a fim de analisar teores de cloreto de sódio, iodo e sólidos insolúveis em água presentes neles. Coletar e analisar amostras dos sais a fim de analisar suas diferenças; Caracterizar quantitativamente o teor de sódio, iodo e sólidos insolúveis dos sais; Comparar os teores de sódio, iodo e sólidos insolúveis entre os dois tipos de sais exigidos pela legislação. 2 amostras de marcas diferentes de cada coloração e espessura de sal. Método de Mohr (método de volumetria de precipitação), método de iodometria e método de filtração e secagem em estufa. Em teor de sólidos o sal branco apresentou 0% de sólidos insolúveis, e o rosa apresentou uma média de 1,32% de sólidos entre as marcas analisadas. Para iodo os resultados foram de uma média de 24mg/kg para os sais brancos analisados, e para o sal rosa uma média de 21,5mg/kg de iodo. Para cloreto o sal do tipo branco obteve uma média das marcas analisadas de 7,93% e o tipo rosa uma média de 7,61% de cloreto de sódio. O sal do Himalaia apresentou um teor de sólidos insolúveis bem elevado, já o sal branco um teor de zero de sólidos. Quando se tratou de cloreto de sódio os dois sais chegaram em valores próximos, mas o sal rosa obteve um valor um pouco inferior, nada muito diferente, mas levando em consideração a qualidade do sal em teor de sólidos insolúveis, o sal rosa está em bastante desvantagem. Ao teor de iodo foram determinados valores dentro do padrão estabelecido pela legislação que deveria ser de 15 a 45 mg de iodo por quilo de sal. Podemos concluir que as variedades de sais analisadas se diferenciaram entre si, com relação aos aspectos analisados. Observando os resultados obtidos, os dois tipos de sais se tratam de produtos ricos em sódio, as duas colorações em teores de iodo obtiveram valores na maioria das marcas dentro do valor estimado pela legislação, em teores de sólidos insolúveis o sal branco obteve um teor nulo, já o sal rosa do Himalaia um teor bem elevado, e ambos consumidos em excesso podem causar diversos problemas para a saúde. Órgão de fomento financiador da pesquisa: Unoeste

Pesquisa (ENAPI)

Comunicação oral on-line

UNIVERSIDADE DO OESTE PAULISTA - UNOESTE
Ciências Exatas e da Terra
Química

AVALIAÇÃO DA PRESENÇA DE METAIS POTENCIALMENTE TÓXICOS EM LODO DE ESGOTO PROVENIENTE DE UMA ESTAÇÃO DE TRATAMENTO

GIOVANNE DA SILVA ORACIO
ANDERSON AKIRA YAMAZAKI
DANIEL ÂNGELO MACENA
VINICIUS MARQUES GOMES
JAQUELINE NASCIMENTO DA SILVA

Dentre os estudos voltados que visam minimizar efeitos de resíduos ao meio ambiente e encontrar aplicações de modo que seja reaproveitado, o lodo de esgoto é um resíduo que causa preocupação, rico em matéria orgânica, que contém vários micronutrientes e macronutrientes essenciais para as plantas Neste contexto, esse trabalho tem como objetivo avaliar a presença de metais potencialmente tóxicos em lodo de esgoto proveniente de uma estação de tratamento. Para análise da presença de metais no lodo de esgoto, foi coletada 1 amostra do lodo, que foi acondicionada em frasco âmbar esterilizado e transportado até o Laboratório de Química III localizado no campus II da Unoeste, onde a amostra foi filtrada e passou por um processo de digestão para abertura da amostra. A vidraria utilizada no processo de digestão da amostra foi lavada e descontaminada em ácido nítrico 5% por um período de 24 horas. Para o processo de digestão, foi colocado 250mL da amostra em um béquer, seguido da adição de 30 mL da mistura para digestão (500 mL de água deionizada, 500 ml de HCl (37%) e 185,2 mL de HNO3 (54%)). O béquer foi tampado com um vidro de relógio e levado a chapa de aquecimento, com temperatura de aproximadamente 90 ºC. O béquer permaneceu sob a chapa de aquecimento até que a mistura foi reduzida a aproximadamente 30 mL. Logo após a amostra foi resfriada naturalmente, filtrada e o volume foi completado para 50 mL. A determinação da quantidade de zinco, cobre, chumbo, cádmio e níquel contidas nas amostras foi determinada por espectrometria de absorção atômica com chamas(FAAS)no laboratório de Solos, localizado no campus II da Unoeste. A amostra foi analisada em triplicata Os resultados dos metais Cu, Pb e Ní foram:(8,45 mg/L), (2,87mg/L), (3,17 mg/l) respectivamente, se mostrando acima dos valores permitido pela Resolução CONAMA nº 430/2011 que corresponde 1,0 mg/L, 0,5mg/L e 2,0mg/L Já os metais Cd e Zn apresentaram valores: (0,051mg/L) e (2,59mg/L) respectivamente, abaixo dos valores permitido da mesma resolução 0,2mg/L e 5,0mg/L A presença dos metais Cu, Pb e Ní e a sua concentração acima dos valores permitidos pode estar associada a efluentes industriais, responsável pela maior parte das concentrações elevadas nos lodos Conclui-se que o lodo de esgoto avaliado apresenta concentração dos metais cobre, chumbo e níquel acima do permitido pela legislação, evidenciando a necessidade de avaliar lodos de esgoto para minimizar os riscos que o uso indevido desse material pode causar.

Pesquisa (ENAPI)

Comunicação oral on-line

UNIVERSIDADE DO OESTE PAULISTA - UNOESTE
Ciências Exatas e da Terra
Química

AVALIAÇÃO DA PRESENÇA DE METAIS POTENCIALMENTE TÓXICOS NA REPRESA CICA DE PRESIDENTE PRUDENTE-SP

LUAN CHRISTIAN DOS SANTOS
DANIEL ÂNGELO MACENA
VINICIUS MARQUES GOMES
JAQUELINE NASCIMENTO DA SILVA

Apesar de todos os esforços para armazenar e diminuir o seu consumo, a água está se tornando um bem escasso e sua qualidade se deteriora cada vez mais rápido. Contaminações dos leitos dos rios são em geral associados ao descarte ilegal de resíduos domésticos, industrial e ao chorume de aterros sanitários que contaminam os lençóis freáticos com microrganismos patogênicos. Devido ao alto consumo e poluição, torna-se importante avaliar a possível presença de metais que não desempenham funções vitais no organismo. Dessa forma, o presente trabalho visa avaliar a presença de metais tóxicos na água da represa Cica localizada em Presidente Prudente-SP. Para análise da presença de metais na água, foram coletadas 5 amostras em diferentes pontos a margem da represa. As amostras foram acondicionadas em frascos âmbar esterilizados e transportadas até o Laboratório de Química III localizado no campus II da Unoeste, onde foram filtradas e passaram por um processo de digestão ácida. A vidraria que foi utilizada no processo de digestão das amostras foi lavada e descontaminada por submersão em ácido nítrico 10% por um período de 24 horas. Para o processo de digestão ácida, foi medido 100 mL da amostra e transferidas para o tubo digestor. Aos tubos foram adicionados 10 mL de ácido nítrico concentrado, 1 mL de peróxido de hidrogênio 30% e, em seguida, foram submetidos a aquecimento em bloco digestor pré-aquecido por duas horas à 120 °C. Após o processo de digestão, as amostras ficaram em repouso durante 2 horas para o resfriamento. Em seguida foram filtradas, e transferidas para balões volumétricos de 25 mL cada. A determinação da quantidade de cromo, cádmio, cobre e níquel contida nas amostras foi determinada por espectrometria de absorção atômica com chama (FAAS) no Laboratório de Solos, localizado no campus II da Unoeste. As amostras foram analisadas em triplicata. Os resultados demonstram que os metais níquel, cádmio e cobre estão com valores acima do permitido pela Resolução CONAMA nº 357/2005 nos cinco pontos analisados. Para o cromo, apenas o ponto 4 apresenta valores permitidos na legislação, enquanto os demais pontos estão acima como os demais metais. Tais resultados evidenciam que é necessário monitorar a qualidade da água da represa, visto que a mesma é fonte de abastecimento de água para a população. Conclui-se que a água não está apropriada para fins de consumo e sugere-se melhor controle e monitoramento de possíveis contaminantes que afetam a qualidade desta água.

Pesquisa (ENAPI)

Comunicação oral on-line

UNIVERSIDADE DO OESTE PAULISTA - UNOESTE
Ciências Exatas e da Terra
Química

BIOATIVOS EM PLANTAS DE ALOE VERA

GRAZIELLI REGINA CAMOSSA
DANIEL ÂNGELO MACENA
MAÍRA RODRIGUES ULIANA
SÉRGIO MARQUES COSTA

Com os novos estilos de vida adotados pela sociedade atual, as empresas alimentícias, farmacêuticas e de cosméticos, passaram a buscar novas fontes de compostos naturais para utilização. Um conhecimento antigo que era usado para queimaduras ou tratamentos capilar vem abrindo novas fronteiras. A babosa (Aloe vera L.) vem se destacando nos últimos anos, existem milhares de plantas com atividade farmacêuticas, mas esta é uma das plantas medicinais mais populares no mundo, podendo ser utilizada para fins estéticos e alimentícios. Este trabalho teve como objetivo quantificar bioativos em Aloe Vera, através do método de flavonoides totais e fenóis totais presentes na mucilagem gel. O delineamento experimental foi inteiramente casualizado, com 4 tratamentos (diferentes plantas e seus diferentes estágios de desenvolvimento), com 3 repetições. Foram avaliados os teores de compostos polifenólicos totais e os teores de flavonoides totais. Os resultados analíticos foram tratados através da análise de variância (ANOVA) e posteriormente comparadas através de teste de médias Tukey. Os teores de compostos fenólicos não foram influenciados pelo tipo de cultivo ou pelo período de desenvolvimento das plantas de babosa, variando de 432 a 422 mg de Ácido gálico por 100 gramas de amostra. No que se refere às concentrações de flavonoides, observamos diferenças tanto entre o modo de cultivo, quanto no período de desenvolvimento das plantas, essas concentrações variaram entre 1,07 e 3,52 mg Rutina por 100 g de amostra em plantas jovens e adultas, respectivamente. Os metabólitos secundários são sintetizados pelas plantas para proteção contra insetos, microrganismos e até mesmo contra os raios UVA e UVB, como o caso específico de alguns flavonoides (FERREIRA et al., 2016). Assim, os menores teores de flavonoides encontradas em plantas jovens podem ser explicados pelo fato de eu as plantas adultas estão expostas a mais tempo ao sol e por isso acumularam esse composto ao longo do seu desenvolvimento. Foi possível concluir que embora a idade ou o tipo de cultivo não exercerem influência nos teores de compostos fenólicos totais nas plantas de Babosa, os teores de flavonoides podem variar de acordo com os sistemas de produção e a fase fenológicas das plantas.

Pesquisa (ENAPI)

Comunicação oral on-line

UNIVERSIDADE DO OESTE PAULISTA - UNOESTE
Ciências Exatas e da Terra
Química

COMPLEXOS HETEROBIMETÁLICOS DE RU(II) E NI(II) COMO CATALISADORES PARA POLIMERIZAÇÃO VIA METÁTESE POR ABERTURA DE ANEL

THAÍS REGINA CRUZ
GUSTAVO HENRIQUE CÍCERO MASSON
VALDEMIRO PEREIRA DE CARVALHO JÚNIOR

A tentativa de combinar diferentes tipos de técnicas de polimerização controlada mecanisticamente incompatíveis tem sido o foco de vários estudos nos últimos anos. Complexos contendo dois diferentes centros metálicos exibem sinergismo e reatividade diferentes quando comparados a compostos contendo apenas um tipo de metal, o que tem atraído interesses nas áreas de polimerização e catálise. A polimerização via metátese por abertura de anel (ROMP) se tornou uma ferramenta efetiva para a preparação de uma ampla variedade de polímeros bem definidos. Neste trabalho, reportamos a síntese de um novo complexo heterobimetalico de Ru-Ni e sua performance como catalisador para reações de ROMP de norborneno. Sintetizar e caracterizar um complexo heterobimetálico para testá-lo como precursor catalítico em reações de ROMP Reações de ROMP: dissolveu-se 1,1 ?mol de complexo em CHCl3 (2 mL) com uma quantidade apropriada de monômero (NBE), seguido pela adição de EDA, sob atmosfera inerte. Ao final do tempo determinado adicionaram-se 5 mL de de MeOH e o polímero foi filtrado. Os poliNBE isolados foram dissolvidos em THF para os dados de GPC. Rendimento de polinorborneno (poliNBE): mono-Ru=68%; Ru-Ni=38% Os complexos mono-Ru e Ru-Ni foram sintetizados e caracterizados por FTIR, UV-Vis, voltametria cíclica e espectrometria de massas MALDI-TOF. O complexo mono-Ru foi adicionalmente caracterizado por RMN. A síntese de poliNBE via ROMP foi conduzida usando mono-Ru e Ru-Ni como pré catalisadores na presença de etil diazoacetetao (EDA). As polimerizações foram avaliadas sob diferentes temperaturas (25 e 50 ºC), razões de [EDA]/[Ru] e [NBE]/[Ru] e tempo (5-60 minutos). Maiores rendimentos de poliNBE foram obtidos usando [NBE]/[mono-Ru ou Ru-Ni] = 5000 e 5 ?L de EDA em 25 °C por 60 minutos de reação. Nestas condições, os poliNBEs obtidos pela catálise mediada pelo complexo mono-Ru apresentaram valores de 68% de rendimento, enquanto o complexo Ru-Ni alcançou 31%. Os valores de massa molecular média (Mn) apresentaram uma ordem de magnitude de 104 g mol?1 e o índice de polidispersidade (IPD) dos polímeros obtidos variaram de 1,31 a 1,74 para o complexo mono-Ru e de 1,10 a 1,34 para o complexo Ru-Ni. Os novos complexos mono-Ru e Ru-Ni foram sintetizados e caracterizados com sucesso e foram ativos na reação de polimerização via ROMP de NBE. O complexo mono-Ru apresentou maior atividade catalítica em comparação ao Ru-Ni alcançando 68% de rendimento em 60 minutos. Órgão de fomento financiador da pesquisa: FAPESP Proc. 2018/06340-1

Pesquisa (ENAPI)

Comunicação oral on-line

UNIVERSIDADE DO OESTE PAULISTA - UNOESTE
Ciências Exatas e da Terra
Química

DESENVOLVIMENTO DE UM SENSOR QUIMIOCAPACITOR BASEADO EM POLÍMERO CONDUTOR MOLECULARMENTE IMPRESSO PARA DETECÇÃO DE CITOSINA

TAINÁ BARBOSA RODRIGUES
HEITOR FURLAN TREVIZAN
ANDRÉ OLEAN OLIVEIRA
MARCOS FERNANDO DE SOUZA TEIXEIRA

A mutação genética é marcada em sua grande maioria pela metilação do DNA, que por sua vez ocorre a partir da adição de um grupo metil na posição 5 do carbono da citosina presente no DNA. Contudo, valores anormais de metilação do DNA são reconhecidas como biomarcadoras de vários tipos câncer. Dessa forma, faz-se necessário o desenvolvimento de sensores para identificação e quantificação de DNA metilado. Estudar e comparar o comportamento eletroquímico do filme polimérico molecularmente impresso (PMI) com o filme polimérico não impresso (PNI) na presença e na ausência de citosina. A construção da PMI foi baseada na eletropolimerização do monômero Bismarck Brown Y contendo conjuntamente 1,0 mmol L-1 de citosina em solução eletrolítica. Os parâmetros da etapa de eletropolimerização foi aplicação de uma varredura de potencial no intervalo -0,3 a 1,0 V com uma velocidade de 25 mV s-1.Para fins comparativos, o filme de polímero não impresso (PNI), foi sintetizado usando os mesmos parâmetros experimentais, mas sem a adição da molécula molde de citosina na solução eletrolítica de eletropolimerização. O filme polimérico molecularmente impresso (PMI) foi sintetizado a partir da eletropolimerização contendo 10,0 mmol L-1 do monômero azo Bismarck Brown Y na presença de citosina sobre o substrato condutor de FTO.A fim de investigar a formação da cavidade,o sensor PMI-(azo-BBY) apresentou uma diferença em relação a magnitude de corrente anódica e catódica, no intervalo de potencial de -0,1 até 0,5 V (vs. ECS) na presença de 1,0 mmol L-1 de citosina, indicando a formação de cavidades específicas e os sítios de ligação da citosina. Este aumento significativo na corrente capacitiva indica que o filme é muito poroso, o que está diretamente relacionado com a formação das cavidades.O filme de PNI-poli (azo-BBY) não apresentou um aumento de corrente capacitava sob as mesmas condições experimentais, sendo assim, o aumento da corrente capacitiva do filme PNI-poli(Azo-BBY) está diretamente relacionada com a formação das cavidade.Ambos os filmes apresentam comportamento semelhante em solução aquosa na ausência de citosina. Neste trabalho foi realizado a eletrossíntese do filme-PMI-(azo-BBY) e comparado com o filme PNI-(azo-BBY).O sensor impresso apresentou uma diferença no valor de corrente capacitiva quando comparado com o filme não impresso, indicando a formação de cavidades e os sítios de ligação para a citosina.

Pesquisa (ENAPI)

Comunicação oral on-line

UNIVERSIDADE DO OESTE PAULISTA - UNOESTE
Ciências Exatas e da Terra
Química

DETERMINAÇÃO DA CONCENTRAÇÃO DE CHUMBO TOTAL EM ANÉIS CONCÊNTRICOS DE ÁRVORES SOBRE ÁREAS DE FALHA NEOTECTÔNICA

MIQUÉIAS DE LIMA PORTUGAL
MARCOS FERNANDO DE SOUZA TEIXEIRA
KEVIN FELIPE RAMOS

Monitorar e determinar a concentração de metais potencialmente tóxicos, no ambiente como também identificar as regiões de que estão em risco e o nível de risco são importante, devido as características de bioacumulação apresentadas pelos mesmos, de modo a proporcionar um aumento constante da concentração. Os elementos traços podem ser medidos e analisados usando o método de amostra direta da atmosfera ou amostragem usando indicadores biológicos. A aplicação de anéis arbóreos de crescimento como biomonitores de metais tóxicos, especificamente o chumbo, presente na série de decaimento do radônio 222 (222 Rn) tem sido explorada na presente pesquisa. Dessa forma, a presente pesquisa tem como objetivo determinar a concentração de chumbo total (210 Pb, 208 Pb, 207 Pb e 206 Pb) nos anéis arbóreos sobre áreas com falhas geológicas, bem como avaliar a influência dos materiais particulados atmosféricos nos anéis arbóreos de crescimento. As massas dos anéis concêntricos foram tomadas e em seguida realizou-se o tratamento em meio ácido para destruição da matéria orgânica sem volatização dos contaminantes. As concentrações de chumbo total nos anéis arbóreos das amostras foram analisadas e quantificadas pela técnica de voltametria de pulso diferencial por redissolução anódica VRA, por meio de um polarógrafo processador 797 VA (Metrohm). Coletou-se amostras do lenho da espécie Caesalpinia pluviosa e Licania tomentosa. O local de coleta das amostras ocorre no município de Presidente Prudente na localização da Faculdade de Ciências e Tecnologia (FCT/UNESP) onde encontram-se anomalias neotectônicas, em setembro do ano de 2020. Por meio das análises, verificou-se que os valores de concentração de chumbo total nos anéis de crescimento da espécie arbórea Caesalpinia pluviosa variam de 1,03318519 a 9,992766658 µg. g-1. A partir dos resultados obtidos analisou-se que as variações anuais das concentrações de chumbo total nas espécies arbóreas, correlaciona com a localização e direção da provável falha geológica na região, o que proporciona uma emanação do gás radônio efetiva e intensa, coexistindo com uma elevada concentração de chumbo. A técnica de voltametria de pulso diferencial por redissolução anódica mostrou-se eficiente para analisar chumbo total nas amostras de anéis de crescimento dos elementos traços. Órgão de fomento financiador da pesquisa: CNPq

Pesquisa (ENAPI)

Comunicação oral on-line

UNIVERSIDADE DO OESTE PAULISTA - UNOESTE
Ciências Exatas e da Terra
Química

DETERMINAÇÃO DE METAIS NO LEITE

AMANDA FERREIRA SILVA
VINICIUS MARQUES GOMES
DANIEL ÂNGELO MACENA

O leite é uma das bebidas mais consumidas no mundo além de ser considerável um alimento indispensável para o ser humano desde o nascimento. Com o passar dos anos e os avanços tecnológicos uma atenção maior foi voltada para o leite devido os metais, que poderiam chegar a contaminarem o leite por diversas fontes como a poluição ambiental, o solo que contaminam as pastagens e as fontes de água, o uso de medicamentos veterinários ou até mesmo pelo contato do leite com superfícies metálicas não estanhadas. Dessa forma a escolha desse tema foi com propósito de alertar os riscos à saúde decorrentes a exposição dos MTP's (Metal Potencialmente Tóxico) neste caso: cobre, cádmio, chumbo e crômio que são os que se apresentam na maioria dos trabalhos encontrados Realizar análises de determinação quantitativa e/ou qualitativa desses metais citados a cima com o método de espectrometria de absorção em chama, para verificação deles relação aos dados informados do leite e julgar se eles se encontram dentro ou fora do padrão permitido. 2 marcas de leite diferentes denominadas X e Y, das categorias integral, desnatado e semidesnatado. Método realizado através de Espectrometria de Absorção de Atômica. Comparando as marcas X e Y de modo geral ambas possuem doze resultados de médias cada uma, a marca X obteve nove resultados acima do permitido em relação aos metais que foram comprovados maiores do que os limites máximos de tolerância estabelecidos, já a marca Y obteve seis resultados também a cima do valor permitido em relação à média desses metais comprovados maiores do que os limites já citados. Foram encontrados poucos artigos relacionados a metais no leite, porém todos que foram encontrados haviam a presença de algum dos metais estudados que eram Chumbo, Cobre, Cádmio e Crómio. Conclui-se que as marcas analisadas X e Y, apresentaram estar contaminadas pelos metais crômio e chumbo em quantidades excessivas, que podem ser provenientes desde o a poluição ambiental, o solo que contaminam as pastagens e as fontes de água, o uso de medicamentos veterinários até mesmo pelo contato do leite com superfícies metálicas não estanhadas, e vale ressaltar novamente que devido os valores encontrados serem relativamente baixos para serem detectados pelo método de FAAS, é possível que também existam ruídos no aparelho. Órgão de fomento financiador da pesquisa: Unoeste

Pesquisa (ENAPI)

Comunicação oral on-line

UNIVERSIDADE DO OESTE PAULISTA - UNOESTE
Ciências Exatas e da Terra
Química

DETERMINAÇÃO DE METAIS TOXICOS E FURFURAL EM BEBIDAS ALCOOLICAS

RAQUEL DE ALMEIDA
VINICIUS MARQUES GOMES
DANIEL ÂNGELO MACENA

O teor de metais tóxicos em amostras de bebidas e alimentos é de grande preocupação devido à sua difícil excreção e alta toxicidade. Por conta dessa alta toxicidade os alimentos e bebidas ingeridos precisam estar livres de tal contaminação. Também foi analisado a concentração de furfural nas cachaças, composto orgânico de alta toxicidade. Este trabalho teve como objetivo determinar em bebidas alcóolicas a concentração de cadmio, chumbo, cobre e furfural e comparar os resultados das análises com a legislação nacional. Para realização das análises foram escolhidas 2 amostras de cada bebida. Foi feita a digestão em meio ácido para determinação dos metais, e analisadas no espectrofotômetro de absorção atômica de chama. Para determinação do furfural foi usado o método de Hewitt´s, que é baseado no desenvolvimento de coloração rósea pela reação do furfural e anilina em meio ácido, e feito leitura no espectrômetro visível à 520nm. Nos resultados obtidos para o cadmio, todas as amostras estavam acima do limite estabelecido pela legislação que é 0,02mg/L. Para chumbo, somente a amostra de cerveja A estava em conformidade com a legislação com limite de 0,2mg/L. Nas analises de cobre, todas as amostras estavam dentro dos padrões estabelecidos pela legislação que é 0,5mg/L. Para o furfural, as duas cachaças não apresentaram níveis acima do permitido, que é 5mg/100mL de produto. Os resultados das comparações no método de amostragem revelou que pode-se ingerir metais que são tóxicos. A presença dos metais encontrados é provavelmente por conta da água e/ou contaminação do solo para o cultivo da matéria prima utilizada nos processos de fabricação (lúpulo, cevada, cana-de-açúcar, ou no local de plantação das videiras). Podemos verificar nesse estudo que em diferentes tipos de bebidas alcoólicas comercializadas, há falhas no controle de qualidade em relação a alguns metais tóxico, que os metais tóxicos ainda são ingeridos no consumo de bebidas. Sobre o furfural é possível concluir que o envelhecimento das cachaças está sendo melhor monitorado para a não formação de grande quantidade do composto. Órgão de fomento financiador da pesquisa: As análises foram feitas no laboratório de química II, localizado no bloco Q na UNOESTE, financiado pela própria instituição citada.

Pesquisa (ENAPI)

Comunicação oral on-line

UNIVERSIDADE DO OESTE PAULISTA - UNOESTE
Ciências Exatas e da Terra
Química

ESTUDO METODOLOGICO NO DESENVOLVIMENTO DE UM SENSOR ELETROQUÍMICO BASEADO EM AZO-POLÍMERO MOLECULARMENTE IMPRESSO PARA DETECÇÃO DE CAFEÍNA NA INVESTIGAÇÃO FORENSE

NATALIA MARÇAL SILVA
HEITOR FURLAN TREVIZAN
ANDRÉ OLEAN OLIVEIRA
MARCOS FERNANDO DE SOUZA TEIXEIRA

A cocaína é uma das drogas de abuso ilegais mais utilizadas no mundo. Comumente traficada na forma de pó, a cocaína recebe diversos adulterantes como, a cafeína, xilocaína, benzocaína, entre outros, na intenção de diluir o produto e aumentar os lucros. Essas características únicas podem servir de impressão digital, alimentando um banco de dados a fim de obter um mapeamento que corrobore com investigações policiais a respeito da origem e rotas de tráfico. Nesse sentido, faz-se necessário o desenvolvimento de sensores capazes de identificar e quantificar com exatidão esses adulterantes e auxiliar no mapeamento da procedência da droga Investigar a influência da velocidade de varredura e do número de ciclos na etapa de eletropolimerização do polímero impresso sobre a resposta analítica do sensor para análise de cafeína como adulterante A construção da MIP deu-se através da formação do filme polimérico por eletropolimerização utilizando 1,0 mmol L-1 de cafeína com 10 mmol L-1 do monômero Bismarck Brown Y com HCl a 0,10 mol/L em um pH de 2,0 aplicando varredura de potencial de -0,3 a 1,0 V A fim de alcançar um melhor desempenho analítico do sensor, foram otimizados parâmetros como velocidade de varredura e número de ciclos na etapa de eletropolimerização. Em vista disso, foram aplicadas diferentes velocidades de varredura (10, 25, 50, 100, 150 mV/s) na presença de 1,0 mmol L-1 de cafeína durante a eletrossíntese do polímero PMI-poli(azo-Bismarck Y). A resposta analítica do sensor foi avaliada através da variação de corrente (?Ianodica) no potencial de 0,3 V (vs. ECS) na ausência e na presença de 1,0 mmol L-1 de cafeína em solução eletrolítica de KCl. Dessa forma, verificou-se que o filme PMI-poli(azo-Bismarck Y) formado para uma taxa de varredura de 10 mV s-1 apresentou melhor desempenho eletroquímico. A melhor resposta eletroquímica para a cafeína pode ser atribuída a formação de um filme mais uniforme, permitindo uma melhor interação entre as cavidades e os sítios de ligação da cafeína. O número de ciclos na eletropolimerização foi variado entre 5 a 50 ciclos. De acordo com a análise realizada, foi possível verificar que ciclos inferiores a 40 resultam em uma formação insuficiente de sítios de ligação, de modo que ciclos superiores a 40 acabam obstruindo os sítios de ligação e as cavidades da cafeína presentes na rede polimérica do polímero PMI-poli(azo-Bismarck Y) O sensor foi otimizado visando o melhor desempenho eletroquímico do PMI

Pesquisa (ENAPI)

Comunicação oral on-line

UNIVERSIDADE DO OESTE PAULISTA - UNOESTE
Ciências Exatas e da Terra
Química

IDENTIFICAÇÃO DOS TERPENOS DO ÓLEO ESSENCIAL DE MENTRUZ CULTIVADOS EM PRESIDENTE PRUDENTE

DIANA APARECIDA DANTAS VIEIRA
ANA BEATRIZ LIMA SOARES
CESAR VANDERLEI NASCIMENTO

Mentruz ou Erva De Santa Maria é o nome popular para Chenopodium ambrosioides uma erva aromática com crescimento espontâneo, possui diversos efeitos medicinais que foram descobertos pelo conhecimento popular passados de geração em geração, atualmente ela anda sendo pouco investigada e estudos mais profundos dessas substancias podem levar a produção de medicamentos, cosméticos, entre outros. O presente trabalho realizou a obtenção do extrato bruto desta com o intuito identificar os terpenos presentes do óleo essencial, monoterpenos e sesquiterpenos, seguido de um estudo das suas propriedades químicas. A extração foi realizada secando a planta em uma estufa de recirculação de ar apropriada para solos e folhas, após seca foi triturada em um moinho, em seguida deixada em repouso em álcool etílico absoluto por dez dias e posterior evaporação do álcool em um evaporador rotativo, restando-o extrato bruto. O qual foi analisado em cromatografia de camada delgada, usando uma solução de tolueno com acetato de etila como fase móvel, luz UV como revelador físico e vanilina sulfúrica como revelador químico. Feita a revelação foram analisados os resultados obtidos. Após colocado na câmara de luz UV a placa apresentou colorações alaranjadas em maior quantidade e pequenas manchas azuis, em seguida com a aplicação da solução de vanilina o arraste obteve coloração azul cinzento. A resposta final foi inconclusiva, ou seja, a mesma não foi possível identificar com certeza os terpenos procurados quando comparado o resultado a bibliografia usada que indicava uma coloração final roxa. Pode-se deduzir que segundo a literatura os óleos essenciais normalmente possuem concentrações baixas em média 0,5% além do baixo peso molecular, ou ainda as cores apresentadas na luz UV podem ser indícios de compostos fenólicos e alcaloides. Ainda sim foram arrastadas substancias na placa cromatográfica. A tentativa de identificação desses terpenos foi realizada com base na sua utilização pela população em que realizam chás e compressas com a planta inteira, porém o resultado foi inconclusivo realizar a revelação dos mono e sesquiterpenos em cromatografia de camada delgada visto que como a planta possui baixíssimas concentrações dos mesmos sendo necessário a utilização de equipamentos mais sofisticados e precisos além de uma extração mais especificas.

Pesquisa (ENAPI)

Comunicação oral on-line

UNIVERSIDADE DO OESTE PAULISTA - UNOESTE
Ciências Exatas e da Terra
Química

LICOR DE PITAYA: AVALIAÇÃO FÍSICO-QUÍMICA E BIOQUÍMICA

MYLENA APARECIDA FERREIRA DA SILVA
ATILAS CÍCERO ANDRADE BARROS
DANIEL ÂNGELO MACENA
GABRIEL BATEZATI RABELO VALÉRIO
THALIA CAROLINE SILVA DA COSTA
SÉRGIO MARQUES COSTA
MAÍRA RODRIGUES ULIANA

A pitaya é uma fruta rica em diversos compostos que podem proporcionar benefícios à saúde, em destaque os polifenóis, que apresentam um alto poder antioxidante. A produção e qualidade de licores de fruta além do sabor, pode agregar valor ao fruto, ademais, possibilita a diminuição de perdas na pós-colheita. A partir disto, esse trabalho teve como objetivo a síntese de licores de pitaya, utilizando polpa e casca desta fruta. A fim de se obter uma bebida de boa qualidade visando a sustentabilidade. Assim, foram produzidos os licores de pitaya e em seguida foram realizadas análises para a sua caracterização: densidade, teor alcoólico, açúcares redutores e açúcares solúveis totais, vitamina C, polifenóis totais, flavonoides, pigmentos e atividade antioxidante (DPPH e FRAP). O experimento foi conduzido com um delineamento experimental inteiramente casualizado com 2 tratamentos (licor de casca de pitaya e licor de polpa de pitaya), com 5 repetições. Os dados das análises foram tratados pela análise de variância (ANOVA), seguidos de teste de comparação de médias, por meio do software estatístico ASSISTAT (7.7 pt). Constatou-se que, o processo utilizado para elaboração de licor foi promissor, e a fruta pitaya e sua casca sem dúvida tem uma grande capacidade de industrialização para elaboração de novos produtos, em especial aos licores. Embora os processos de produção foram os mesmos, os licores oriundos das polpas de pitaya resultaram em valores de pH, teor alcoólico, vitamina C, polifenóis e atividade antioxidante (DPPH e FRAP) maiores (4,8; 41,9 °GL; 4,7 mg.100 mL-1; 55,2 Eq. de Ác. Gálico mg.100 g-1; 4,2 e 35,4 TEAC; respectivamente), quando comparados com as bebidas das cascas (4,6; 30,5 °GL; 3,5 mg.100 mL-1; 50,8 Eq. de Ác. Gálico mg.100 g-1; 2,8 e 26,4 TEAC; respectivamente). Esses resultados não eram exatamente os esperados, uma vez que as cascas das frutas são conhecidas por possuírem maiores quantidades desses compostos, tais como fenóis . Esse fato pode ser explicado uma vez que durante o processo, houveram duas filtrações e é importante colocar que a casca da pitaya apresenta uma grande quantidade de mucilagem, fato esse que dificultou o processo de produção dessa bebida e pode ter influenciado nos resultados dos parâmetros avaliados. A partir dos resultados obtidos concluímos que os licores de polpa e casca de pitaya desenvolvidos nesta pesquisa possuem qualidade e podem ser alternativas para o mercado de bebidas. Órgão de fomento financiador da pesquisa: APEC.

Pesquisa (ENAPI)

Comunicação oral on-line

UNIVERSIDADE DO OESTE PAULISTA - UNOESTE
Ciências Exatas e da Terra
Química

PADRÃO DE IDENTIDADE E QUALIDADE DE VINAGRES

LUAN RICHARD BISPO ALVES DA SILVA
JOSE CARLOS DE SOUZA
DANIEL ÂNGELO MACENA
THALIA CAROLINE SILVA DA COSTA
SÉRGIO MARQUES COSTA
MAÍRA RODRIGUES ULIANA

O termo vinagre, deriva do francês vinaigre, que quer dizer vinho azedo, ou seja, produto da transformação do álcool em ácido acético por bactérias acéticas. O vinagre é um composto bastante utilizado no preparo de alimentos. Caracterizar e verificar a qualidade desses produtos é de grande importância para a certificação dos padrões de identidade e qualidade, uma vez que o consumidor final não possui acesso às análises que asseguram os mesmos. O objetivo do trabalho foi caracterizar vinagres comerciais, utilizando os padrões de identidade e qualidade da legislação brasileira como parâmetros. Foram analisadas nove amostras de diferentes tipos e marcas de vinagres comerciais de frutas e vegetais, comercializados em um determinado mercado. A escolha das amostras foi realizada de forma aleatória. O delineamento experimental foi inteiramente casualizado com 9 tratamentos (diferentes tipos e marcas de vinagres), com 3 repetições, que foram representadas pelas embalagens comerciais das amostras. Foram avaliados nas amostras comerciais de vinagres e fermentados acéticos os seguintes parâmetros: pH, cinzas, densidade a 20°C, teor alcoólico real, extrato seco total e reduzido, acidez total, volátil e fixa, açúcares redutores e totais, polifenóis totais, capacidade antioxidante pelo DPPH e pelo FRAP. Os pHs das amostras analisadas variaram de 2,2 a 2,8 e a acidez total e volátil de 2,9 a 4,7 g ác. acético.100 mL-1. Todas as amostras avaliadas apresentaram valores de 0,5% de álcool em volume. Pode-se observar que o vinagre de maçã (marca 2) é o mais encorpado, seguido pelos vinagres de vinhos tintos, vinhos brancos e maçãs (ambas marcas), e por último e menos encorpados, os vinagres de arroz (marca 1) e álcool (marcas 1 e 2). Todas as amostras de vinagre demonstraram a presença de compostos fenólicos e atividade antioxidante. As avaliações realizadas indicam que os vinagres avaliados se enquadram nos limites estabelecidos pela legislação brasileira. Diferenças da qualidade das matérias-primas, tipos de processo e microrganismos resultam produtos com características diferentes. As amostras de vinagres e fermentados acéticos comerciais avaliadas apresentaram parâmetros dentro dos limites legais permitidos pela legislação brasileira e além disso, os vinagres de vinho tinto e maçã apresentaram maiores teores de polifenóis totais e capacidade antioxidante, indicando que são produtos que podem trazer maiores benefícios à saúde de quem os consomem. Órgão de fomento financiador da pesquisa: APEC.

Pesquisa (ENAPI)

Comunicação oral on-line

UNIVERSIDADE DO OESTE PAULISTA - UNOESTE
Ciências Exatas e da Terra
Química

PROCURA IN SILICO POR NOVOS MEDICAMENTOS PARA O COMBATE DA ESQUIZOFRENIA

HAMILTON MITSUGU ISHIKI
GABRIEL ANGELI SILVA

A esquizofrenia é uma patologia do sistema nervoso central (SNC) considerada grave e incapacitante sendo um problema de saúde pública mundial. A doença é caracterizada pelos sintomas psicóticos que afeta a capacidade de tempo e espaço, dessa forma através das hipóteses dopaminérgicas foram criados os antipsicóticos, principalmente o Haloperidol. Apesar de ser o mais usado possui muitos efeitos adversos e, com isso, há a necessidade de aperfeiçoar esses tipos de medicamentos para que tenham melhor eficácia terapêutica e menos efeitos. Efetuar uma busca virtual e estudos de Docking Molecular na tentativa de se encontrar novos compostos que possam ser utilizados no tratamento da esquizofrenia. A primeira etapa foi realizar uma busca no banco de dados do Sistemat-X, por inibidores oriundos de produtos naturais, que sejam análogos ao haloperidol. Este requisito é desejável, pois deste modo os compostos provavelmente irão atuar através da inibição da mesma proteína e no mesmo sítio ativo do haloperidol, ou seja, no receptor ?-1. Em seguida, os compostos encontrados foram submetidos aos cálculos de docking molecular, onde tiveram os valores das energias de interação com a proteína calculados. A etapa da busca virtual por compostos análogos ao haloperidol resultou em 18 compostos. Estes compostos tiveram as energias de interação com o receptor ?-1 (código PDB: 5HK2) calculadas, sendo que apenas 5 tiveram energias mais favoráveis em relação ao haloperidol. Para os 18 compostos foram encontrados valores de energia que variam entre -111,54 kcal/mol a -78,49 kcal/mol. A energia calculada para o haloperidol foi de -98,02 kcal/mol. Os resultados indicam que o sítio de ligação dos compostos estudados é o mesmo do haloperidol, o que foi verificado visualmente, indicando que o mecanismo de inibição dos compostos deva ser idêntico ao do haloperidol. Os 5 compostos que tiveram melhor energia de interação do que o haloperidol podem ser potenciais fármacos contra a esquizofrenia. Infelizmente, apenas através de estudos experimentais será possível determinar se realmente estes compostos possuem ou não a atividade desejada.

Pesquisa (ENAPI)

Comunicação oral on-line

UNIVERSIDADE DO OESTE PAULISTA - UNOESTE
Ciências Exatas e da Terra
Química

SELEÇÃO IN SILICO DE NOVOS INIBIDORES PARA O COMBATE DO ADENOCARCINOMA DE CÓLON RESISTENTE

HELEN BRAMBILA JORGE PAREJA
ADRIANO JUNQUEIRA DE MORAES
HAMILTON MITSUGU ISHIKI

O câncer colorretal (CCR) está entre as quatro principais causas de morte no mundo. No Brasil, estima-se que entre 2020-2022, surjam 40.990 novos casos e o total de óbitos, por ano, pode chegar a 20.578. Os tratamentos convencionais para o CCR incluem cirurgia, quimioterapia e radioterapia, sendo que esses tratamentos possuem muitos efeitos colaterais devido à sua inespecificidade e citotoxicidade para quaisquer células que estão crescendo e se dividindo. A inibição da p53 mutante desempenha um papel fundamental na supressão tumoral, uma vez que mais da metade dos pacientes com CCR são portadores dessa anomalia genômica. O uso da modelagem molecular permite que novos ligantes possam ser inseridos nas enzimas para determinar as energias de interação e, desta forma, propor potenciais inibidores. Verificar a energia de interação entre compostos selecionados em um banco de dados e a p53 para simular o poder de inibição destes compostos. A primeira etapa foi a busca realizada no banco de dado do SISTEMAT-X, por compostos análogos ao fragmento do 6,7-diidro[1,4]dioxino[2,3-f][1,3]benzotiazol-2-amina. A estrutura tridimensional da p53 mutante Y220C, utilizada como receptor, foi extraída do Protein Data Bank (2X0U). Os compostos encontrados foram submetidos aos cálculos de docking no programa iGEMDOCK, e tiveram as energias de interação calculadas. A procura no banco de dados resultou em 216 compostos análogos à 6,7-diidro[1,4]dioxino[2,3-f][1,3]benzotiazol-2-amina. Estes compostos foram submetidos a uma análise para verificar se estavam de acordo com a regra dos 5, de Lipinski, através do programa SwissADME e, do total, 127 compostos foram aprovados. Nas análises de docking, foram selecionados os 20 melhores resultados, através dos valores de energia de interação. Todos estes compostos possuem energia de interação melhor do que o composto utilizado como molde e interagem no mesmo local da enzima. A maioria dos compostos selecionados são derivados de flavonóides, sendo que na literatura pode-se encontrar vários artigos demonstrando o poder anticancerígeno desta classe de compostos. Através deste estudo foi possível selecionar vários compostos com potencial atividade anticancerígena, derivados dos flavonóides. O ligante complexado com a enzima apresentou uma energia de ligação de -102.8 kcal/mol. Os 20 melhores compostos apresentaram energias que variaram de -146.3 a -136.0 kcal/mol. Ou seja, todos possuem energias de interação mais favoráveis com a p53.

Pesquisa (ENAPI)

Comunicação oral on-line

UNIVERSIDADE DO OESTE PAULISTA - UNOESTE
Ciências Exatas e da Terra
Química

SINTESES DE ANÁLOGOS, PARTINDO DE UM COMPLEXO DE PLATINA COM UTILIZAÇÃO FARMACOLÓGICA.

MYLENA APARECIDA FERREIRA DA SILVA
CESAR VANDERLEI NASCIMENTO

A cisplatina apresenta destaque em métodos de tratamento em neoplastia de esôfago, estomago linforas, pulmões, etc. Este trabalho discute-se a síntese e caracterização de novos complexos de platina alternando a natureza dos ligantes e o estado de oxidação do metal. Os complexos apresentados são compostos de platina (II), platina (IV) e platina (V) contendo ácido 2-furóico hidrazida, iodo e bromo como ligantes, no qual vão ser comparados com complexos de artigos já existentes, com a finalidade de serem biologicamente ativos ou importantes como precursores para o preparo de novos complexos com potencial de atividade antitumoral. sintetizar análogos do complexo de cisplatina, a finalidade é obter o complexo: Tetraiodobis(hidrazida)platina (IV) e o complexo Diiodobis(hidrazida)platina (II); Sintetizou- se e caracterizou - se os complexos análogos de platina (IV) e (V), a partir de seu complexo de platina (II). Analisa as propriedades Fisico quimicas de pH, condutividade e turbidez. Síntese 1: Complexo Pt(II) (Agitação Rápida) - 32,5%. Síntese 2: Complexo Pt(II) (Agitação Lenta)- 95,64%. Síntese 3: Complexo Pt (IV) - 60,11%. Síntese 4: Complexo Pt(V) -31,26%. Os resultados obtidos nesse trabalho mostraram rendimentos diferentes dos complexos, o que esta relacionado ao tempo e velocidade de agitação. As analises físico químicas relatam uma maior condutividade e turbidez do complexo de platina (V), pelo fato de possuir uma maior quantidade de ions, comparado com os outros complexos sintetizados. Os complexos platina (II) e (IV) se mostram semelhantes. Este fator se torna interessante para um fonte de estudo do platina (V) já que se apresenta uma grande diferença química dos outros. Conclui-se que o rendimento do complexo de platina (II) com agitação lenta foi o maior entre todos os obtidos, isso se deve ao fato da esterioquimica do complexo ser mais favorecida e também pela agitação lenta, que fornece ao meio reacional uma melhor complexação dos ligantes ao metal. Todos os complexos pretendidos foram obtidos e caracterizados com analises físico-químicas, mostrando que as rotas de sínteses são eficientes e podem ser reproduzidas

Pesquisa (ENAPI)

Comunicação oral on-line

UNIVERSIDADE DO OESTE PAULISTA - UNOESTE
Ciências Exatas e da Terra
Química

USO DE AGUAPÉ COMO PLANTA FITORREMEDIADORA DO HERBICIDA AMETRINA EM EFLUENTE SINTÉTICO

JHONATAN RICARDO DE SOUZA SANTOS
VICTOR HUGO SILVA DOS REIS
CESAR VANDERLEI NASCIMENTO
DANIEL ÂNGELO MACENA
CIBELY DA SILVA MARTIN SONVESSO

Os herbicidas contêm alta seletividade e meios muitos específicos de ação, porém, ainda pode haver contaminações as quais atingem organismos não alvos, o que então aponta a necessidade de que estes contaminantes sejam retirados do sistema. O presente trabalho teve como objetivo testar o processo de fitorremediação do herbicida ametrina em efluente sintético, processo este, que tem como principal finalidade a descontaminação de ecossistemas por variados tipos de poluição. Foi utilizado como ferramenta bioindicadora o Aguapé (Eichhornia crassipes), planta que contém caráter fitorremediador significativo, foi avaliado seu comportamento em efluente sintetizado em laboratório contendo 50 µg L-1 de ametrina como princípio ativo (herbicida utilizado comumente na cana de açúcar e em outras culturas de folhas largas para controle de plantas daninhas). A planta foi adicionada em cinco recipientes contendo o efluente sintético e a concentração de ametrina neste efluente foi analisada no 1º, 7º, 14º e 21º dia de tratamento. As análises foram realizadas utilizando a técnica de espectrofotometria UV-vis, juntamente com sensor baseado em nanopartículas de ouro (AuNPs). Os resultados foram obtidos em µg.L-1 tanto para o grupo tratamento quanto para o grupo controle obtendo-se os seguintes valores: Dias Controle Tratamento 1º Dia 50 ± 1µg.L-1 50 ± 2µg.L-1 7º Dia 40 ± 1µg.L-1 10 ± 2µg.L-1 14º Dia 40 ± 1µg.L-1 * 21º Dia 30 ± 3µg.L-1 * Nota: *Não detectável. Através dos resultados notou-se que houve degradação natural do herbicida ametrina, porém, no 21º dia ainda constatou-se a presença de 60% do herbicida no grupo controle. Enquanto no grupo tratamento não houve a sua detecção. Diante da comprovação da eficiência fitorremediadora do aguapé, pôde-se visar possibilidades de aplicações desta mesma técnica em efluentes sintéticos com diferentes concentrações, a fim de investigar um limite máximo do potencial de fitorremediação da planta utilizada. Conclui-se então que a planta biodincadora foi capaz de reduzir a concentração deste herbicida presente no efluente sintético, podendo ser utilizada para aplicação da técnica de fitorremediação. Órgão de fomento financiador da pesquisa: UNOESTE - Universidade do Oeste Paulista