

Saponinas são glicosídeos produzidos por plantas, formados por uma aglicona policíclica (um triterpeno ou um esteróide) e uma cadeia sacarídica. Essas biomacromoléculas podem apresentar ações antinociceptivas, antitumorais, antivirais, antiinflamatórias e antitrombóticas. Neste contexto, as saponinas triterpênicas Erucasaponina A e Estelatosídeo B, extraídas do cactáceo *Stenocereus eruca*, são os objetos de estudo deste trabalho que visa avaliar a capacidade de metodologias computacionais na descrição e predição da conformação de glicoconjugados em solventes não aquosos, neste caso, a piridina. Os parâmetros para a piridina foram obtidos através da base HF/6-31G**, enquanto as ligações glicosídicas das saponinas estudadas foram descritas por mapas de energia, com rotação dos ângulos Φ e Ψ de 0° a 360° , em passos de 30° usando o pacote de simulações do GROMACS e o campo de força do GROMOS96, segundo estratégia previamente descrita pelo grupo. A metodologia empregada nos permitiu caracterizar o comportamento conformacional das ligações glicosídicas destas saponinas em piridina, assim como o padrão de flexibilidade das ligações que as constituem. Os parâmetros obtidos, tanto para piridina quanto para as conformações dos compostos, foram validados de acordo com experimentos de NOESY e vão na linha de trabalhos de outros grupos indicando a capacidade de simulações de dinâmica molecular em lidar, mesmo que indiretamente, com as interações π em sistemas moleculares.