

108

ANÁLISE CONFORMACIONAL DE DERIVADOS N-ACILIDRAZONAS EM SOLVENTE AQUOSO. *Clóvis Woicickoski Júnior, Laércio Pol Fachin, Hugo Verli (orient.) (UFRGS).*

O grupamento N-acilidrazona (NAH) constitui-se em um grupo farmacofórico ao qual se atribui diversas atividades biológicas, como cardiotrópica, antiinflamatória e analgésica sendo, portanto, ponto de partida para o planejamento racional de novos agentes bioativos através da adição de grupos funcionais às porções terminais da NAH. Entretanto, a conformação em solução destes compostos, como função de suas interações com o meio circundante, não é conhecida. Neste contexto, este trabalho pretende avaliar as preferências conformacionais de derivados contendo o grupamento NAH. A metodologia empregada envolveu a construção e a análise conformacional de derivados selecionados através de método semi-empírico RM1. Cada mínimo de energia obtido foi submetido a simulações de dinâmica molecular (DM) por 100ns usando o esquema de cargas atômicas de Löwdin, o pacote de simulação GROMACS e o campo de força GROMOS96. Os resultados obtidos indicam contribuições diferenciadas de cada substituinte à conformação adotada pelo esqueleto NAH em solução. Adicionalmente, os resultados demonstram que o meio aquoso está diretamente envolvido na flexibilidade das moléculas estudadas, relacionando-se à diversidade conformacional de cada estrutura e permitindo, dessa forma, a presença de inúmeras conformações co-existindo em solução. Os resultados desse estudo demonstram a importância de considerar a influência do solvente no delineamento do perfil populacional de uma série de moléculas. Da mesma forma, espera-se que os resultados obtidos contribuam no planejamento racional de novos protótipos de agentes bioativos derivados de NAH. (CNPq).