

ESTUDO TEÓRICO DE ALGUNS INTERMEDIÁRIOS RADICALARES E NEUTROS DA ARTEMISININA

Mírian S. Costa (PG), Márcia M. C. Ferreira (PQ)*

[*marcia@iqm.unicamp.br](mailto:marcia@iqm.unicamp.br)

Instituto de Química / Universidade Estadual de Campinas - Unicamp / Campinas – SP / CEP: 13083-970

Palavras Chaves: artemisinina, radicais, cálculos *ab initio*.

O mecanismo de ação de qualquer fármaco é de suma importância para o desenvolvimento do mesmo. Assim, teve por objetivo neste trabalho estudar teoricamente alguns intermediários de reação da artemisinina, a qual possui atividade antimalárica contra *Plasmodium falciparum*. Foram feitos estudos computacionais utilizando cálculos *ab initio*. As geometrias da artemisinina e de alguns intermediários foram otimizadas e calculou-se as energias eletrônicas e livres das moléculas em questão com o intuito de verificar a espontaneidade de algumas rotas de reações propostas. Observou-se, através da análise das energias eletrônicas e energias livres, que o intermediário 20 (Figura) forma-se preferencialmente do ponto de vista energético, além de ser o mais estável. A análise das energias eletrônicas e livres mostra que há a liberação de $-72,18 \text{ kcal mol}^{-1}$ e de $-82,24 \text{ kcal mol}^{-1}$, respectivamente, para a formação deste intermediário, sendo assim a rota preferencial.