

Flávia da Silva Pereira¹ (PG); Kerly Fernanda Mesquita Pasqualoto¹ (PQ); Márcia Miguel Castro Ferreira¹ (PQ)

fpereira@iqm.unicamp.br

¹ Laboratório de Quimiometria Teórica e Aplicada (LQTA), Departamento de Físico-Química, Instituto de Química (IQ), Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), Campinas -SP

PALAVRAS-CHAVE: *malária, artemisinina, método ab initio*

A malária é a mais importante das doenças parasitárias dos trópicos, abrangendo uma população de risco que corresponde a 32% da população mundial. De acordo com a OMS, em 2003, cerca de 350 a 500 milhões de pessoas no mundo inteiro contraíram a doença. Devido ao aparecimento de cepas resistentes, os medicamentos antimaláricos convencionalmente utilizados na terapia têm diminuído a efetividade, criando desta forma uma ameaça ao controle desta endemia. A artemisinina (Fig. 1), princípio ativo extraído da planta *Artemisia annua L.*, tem sido utilizada pela medicina tradicional chinesa por mais de dois mil anos com o propósito de controlar e reduzir os sintomas da doença, constituindo alternativa terapêutica eficaz. Foram realizados cálculos de orbitais moleculares *ab initio* em níveis HF e B3LYP com os conjuntos de base 6-NG, 6-N++G, 6-NG** e 6-N++G**, onde N=31 e 311, a fim de avaliar as propriedades estruturais da artemisinina. A aplicação de métodos quimiométricos não supervisionados, HCA e PCA, permitiram a separação dos métodos *ab initio* HF e B3LYP e, também, a visualização dos conjuntos de base que apresentaram resultados mais aproximados aos dados experimentais: B3LYP/6-31G**, B3LYP/6-311G**, B3LYP/6-31++G** e B3LYP/6-311++G**.

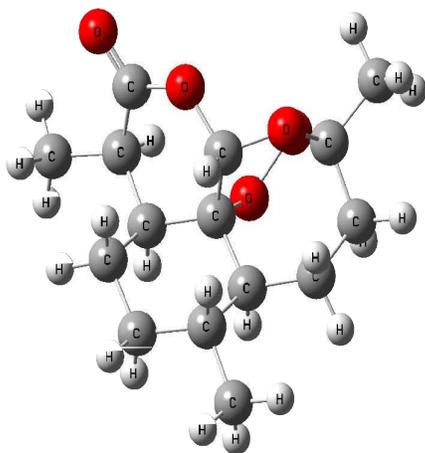


Figura1. Artemisinina.