

MODELAGEM MOLECULAR DE RUTINA, CATEQUINA E QUERCETINA COM ÍON ALUMÍNIO III

Maria Raquel da Silva Duarte¹, Júlio César Silva¹, Aldimar Machado Rodrigues², Henrique Douglas Melo Coutinho¹, Janaina Esmeraldo Rocha¹, Yedda Maria Lobo Soares de Matos¹

Resumo: Os metais tóxicos podem alcançar o ambiente de forma natural através das chuvas e da liberação na crosta terrestre ou de maneira artificial com a utilização de agrotóxicos e pesticidas. Em vista da contaminação dos lençóis freáticos e do solo, destaca-se o íon alumínio como causador de danos ao metabolismo vegetal, responsável por desestabilizar os sistemas ecológicos haja vista sua alta reatividade eletrofílica. Diante disso, a busca por compostos naturais capazes de reduzir sua biodisponibilidade tornou-se crescente, nesse contexto os flavonoides mostraram-se eficazes na ação quelantes e citoprotetora, reduzindo os efeitos nocivos. Portanto, objetivou-se investigar, por meio de simulação computacional, o potencial quelante dos flavonoides rutina, quercetina e catequina frente ao íon alumínio, as estruturas moleculares foram obtidas da base PubChem e modeladas com o auxílio do software Avogadro. Foi utilizado o método semiempírico para os cálculos de otimização das estruturas, além disso, as entalpias de formação e mapas de potencial eletrostático foram realizados no programa MOPAC 2016, PM7, posteriormente houve a simulação de diferentes possibilidades de complexação, considerando interações com grupos distintos como hidroxila, carbonila e moléculas de água. Constatou-se que todos os complexos formados apresentaram entalpias de complexação significativamente negativas, indicando processos energeticamente favoráveis. Entre os compostos analisados, o complexo rutina-Al exibiu o valor mais negativo de entalpia de complexação (-1.810,84 kcal/mol), sugerindo maior estabilidade e afinidade com o metal. A presença de zonas polarizadas evidencia regiões de alta

¹ Universidade Regional do Cariri, e-mail: raquel.duarte@urca.br

¹ Universidade Regional do Cariri, e-mail: juliocesar.silva@urca.br

¹ Universidade Regional do Cariri, e-mail: hdmcoutinho@urca.br

¹ Universidade Regional do Cariri, e-mail: janinaesmeraldo@gmail.com

¹ Universidade Regional do Cariri, e-mail: yedda.lobo@urca.br

² Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Ceará, e-mail: machado.rodriques@ifce.edu.br

X SEMANA UNIVERSITÁRIA DA URCA
XXVIII SEMANA DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA URCA
10 a 14 de NOVENBRO de 2025

Tema: “UNIVERSIDADE E SOCIEDADE NA AGENDA 2030”



densidade eletrônica, ou seja, favoráveis à ligação com o íon Al^{3+} . Infere-se que os resultados demonstram os flavonoides rutina, quercetina e catequina com potencial quelante promissor, principalmente a rutina, contribuindo para o desenvolvimento de medidas de mitigação da toxicidade do alumínio em sistemas ecológicos

Palavras-chave: Flavonoides. Modelagem Molecular. Rutina. Alumínio

Agradecimentos:

Agradecemos a Fundação Cearense de Apoio ao Desenvolvimento Científico e Tecnológico (FUNCAP) pelo financiamento e apoio a pesquisa, a Universidade Regional do Cariri por tecer o aporte necessário para formação profissional e a X Semana de Iniciação Científica da URCA que evidencia a importância do saber científico