



PRODUTOS NATURAIS DE PLANTAS DA CAATINGA COM AÇÃO INIBIDORA NO FOTOSSISTEMA AUXILIADO POR COMPUTADOR

Hugo Gomes do Nascimento¹

1- Bolsista - Instituto Federal de Educação Ciência e Tecnologia do Sertão Pernambucano - Campus - E-mail para contato: hugo.gomes95@outlook.com

RESUMO

Introdução: Os defensivos são muito usados na área agrícola, com diversos propósitos. O Brasil possui uma grande variedade genética vegetal do mundo. Deste modo é possível afirmar que as plantas tem suma importância para a descoberta de novas substâncias. As plantas da caatinga apresentam diferentes mecanismos para conviver com a escassez de água, são plantas muito resistentes a temperatura elevada do sertão. Com desenvolvimento tecnológicos outras ferramentas foram surgindo, com isso agilizando a pesquisa. **Objetivo:** Geral: Desenvolver novos produtos ativos contra fotossistema I e fotossistema II com maior potência e seletividade que os produtos comerciais disponíveis. Compreender o mecanismo de interação dos compostos inibidores dos fotossistemas I e II. • Gerar novos composto ativos contra os alvos, por modificação estrutural dos agentes ativos disponíveis comercialmente e modelagem de novo, almejando potencializar os efeitos ativos e reduzir os adversos em humanos. **Materiais e Métodos:** Banco de dados de atividade foi criado um banco de dados de atividade com informações extraídas do ChEMBL, procurando a inibição com base nas plantas da caatinga sobre o fotossistema. Estes compostos foram classificados ativos e inativos. Assim como proposto foi utilizado um banco de dados com produtos comerciais. As estruturas passaram pelo Standardizer, para canonização das estruturas, adicionando hidrogênios, conversão aromática e otimização da estrutura em 3D. **Resultados:** Durante a elaboração do projeto, foi estabelecido um referencial de valor energético baseado em produtos disponíveis no mercado com a função de atuar como herbicida, sendo seu valor de -127.335. Com a ambientação virtual, pode-se obter resultados energéticos satisfatórios com material da caatinga, atingindo -138.886; -280.825; -436.013; -509.864; -624.912; -660.226; -696.485; -710.141; -757.457; -766.615. Destacando algumas plantas como: angico, pata-de-vaca; catingueira **Considerações Finais:** Com a disposição dos valores energéticos obtidos, pode-se afirmar a possibilidade de elaboração de produtos inibidores do fotossistema, oriundo natural e de ótima qualidade.

Palavras-chave: caatinga; inibidores; seletividade;

AGRADECIMENTOS: Gostaria de agradecer a instituição por fornecer todo o equipamento para a elaboração do projeto, ao meu orientador Vitor Prates Lorenzo, por todo apoio durante a execução do projeto, pelo conhecimento fornecido, a equipe laboratorial e aos meus amigos e familiares que estiveram presente em minha vida sempre me incentivando.

Modalidade: PIBIC/IF Sertão - PE
Campus: Petrolina Zona Rural