

## Topologia Molecular na Predição de Atividade Antioxidante num Grupo de Compostos Fenólicos

Jaime Barros Filho <sup>1</sup>  
Fernando de Souza Bastos<sup>2</sup>  
Diogo da Silva Machado<sup>3</sup>  
Maria Luiza Ferreira Delfim <sup>4</sup>

**Resumo:** Na síntese química, trabalha-se na busca de novos compostos químicos que possam atender a determinados parâmetros, sobretudo, que sejam detentores de propriedades específicas desejáveis. A Topologia Molecular tem sido utilizada neste ramo da Química como ferramenta matemática na predição das potencialidades de uma molécula em manifestar determinadas propriedades. Sendo implementado mesmo antes da síntese do composto, essa ferramenta matemática tem se mostrado capaz de produzir grande economia de tempo e de recursos financeiros. Em [3], por exemplo, J. Gálvez et al., 1994; investigaram a ocorrência de propriedades analgésicas em um determinado grupo de moléculas. Usando Topologia Molecular conseguiram prever com sucesso a ação analgésica em algumas delas, o que culminou com a descoberta de novas moléculas detentoras desta ação farmacológica. Há diversos exemplos de êxito do uso da Topologia Molecular na seleção de novos compostos da indústria química e farmacêutica (ver, por exemplo, [4], [5] e [6]). Entretanto, a despeito do seu desenvolvimento eficaz há décadas, a Topologia Molecular, conforme afirma [1], é pouco conhecida pela comunidade matemática.

No presente trabalho, a Topologia Molecular foi utilizada no estudo da predição de atividade antioxidante de um grupo de compostos fenólicos. Com efeito, os compostos antioxidantes presentes nos alimentos (de seres vivos em geral) são de demasiada importância, sobretudo, pelo fato de que os mecanismos celulares metabólicos geram a produção de radicais livres e os antioxidantes têm a função de reagir com os esses radicais, não permitindo a oxidação e a conseqüente deterioração celular. Para os seres vivos é de suma importância a ingestão balanceada de alimentos com moléculas com essa função, como por exemplo a vitamina E, presente em óleos vegetais, a vitamina C, presente em frutas cítricas, a Curcumina, presente no açafrão-da-terra, entre outras moléculas presentes em alimentos naturais. É sabido que grande parte dos antioxidantes são moléculas com a função orgânica fenol. Neste trabalho, investigamos a propriedade antioxidante de

---

<sup>1</sup>University of California, Riverside, Department of Microbiology and Plant Pathology  
jaimeba@ucr.edu

<sup>2</sup>Universidade Federal de Viçosa, Departamento de Estatística  
fernando.bastos@ufv.br

<sup>3</sup>Universidade Federal de Viçosa, Departamento de Matemática  
diogo.machado@ufv.br

<sup>4</sup>Universidade Federal de Viçosa, Departamento de Química  
maria.delfim@ufv.br

um grupo de compostos fenólicos e obtivemos um modelo de predição que pode auxiliar na busca de novas substâncias com potencial antioxidante. Esse trabalho foi realizado com suporte do convênio (no. 119/2021-UFV) entre a Universidade Federal de Viçosa e a University of California, Riverside.

## Referências

- [1] J. M. Amigó, A. Falcó, J. Gálvez and Y. V. Villar, *Topología Molecular*, Bol. Soc. Esp. Mat. Apl. no 39 (2007), 137-151.
- [2] J. B. Filho, F. S. Bastos, M. L. F Delfim, *Application of Molecular Topology to the Prediction of Antioxidant Activity in a Group of Phenolic Compounds*. Artigo Submetido (2022).
- [3] J. Gálvez, R. García-Domenech, J. V. de Julián-Ortiz and R. Soler, *Topological Approach to Analgesia*, J. Chem. Inf. Comput. Sci. 34 (1994), 1198-1203.
- [4] J. Gálvez, R. García-Domenech, J. V. de Julián-Ortiz and R. Soler, *Topological Approach to Drug Design*, [Erratum to document cited in CA 122:177672]. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*. 1995; 35(5), 938.
- [5] R. García-Domenech, N. Espinoza, R. F. Galarza, M. J. Moreno-Padilha, B. Rojas-Ruiz, L. L. Roldan-Arroyo, M.I. Sanchez-Lavado and J. Gálvez, 2008a *Aplication of molecular topology to the prediction of inhibition of Trypanosoma cruzi Hexokinase by bisphosphonates*, *Ars Pharmaceutica*, 9, 199-209.
- [6] N. Mahmoudi, J.V. de Julian-Ortiz, L. Ciceron, J. Gálvez, D. Mazier, M. Danis, et al. *Identification of new antimalarial drugs by linear discriminant analysis and topological virtual screening*. *Journal of Antimicrobial Chemotherapy*. 2006; 57(3), 489-97.