

# X Encontro de Extensão, Docência e Iniciação Científica - EEDIC

## ESTUDOS PRELIMINARES DE MODELAGEM MOLECULAR DO ÁCIDO GAMA-AMINOBUTÍRICO (GABA) COMO FERRAMENTA PRE-DOCKING

Felipe Kairo de Sousa Lima; Gilderlan Almeida Araújo; Gerliane da Costa Batista; Márcia Machado Marinho; Rondinelle Ribeiro Castro; Emmanuel Silva Marinho

O ácido gama-aminobutírico (GABA) é um aminoácido que ocorre no Sistema Nervoso Central, que desempenha uma função importante na bioquímica neuronal cerebral e nos fenômenos de regulação pós-sináptica e da neurotransmissão autonômica, caracterizada como uma molécula com potencial supressor de pequenos tumores adenocarcinomas pulmonares. Com o auxílio da química computacional, utilizando o programa ACD/ChemSketch, pertencente ao pacote ACD/Labs, foram obtidos as propriedades moleculares básicas para caracterização do GABA. A Análise conformacional, otimização da estrutura tridimensional e obtenção do mapa de potencial eletrostático, foram calculados de acordo com o método de Hartree-Fock (HF), utilizando para isso o software ArgusLab 4.0.1. A energia potencial mínima calculada pela geometria de função convergência para a conformação mais estável do GABA foi encontrada no valor de  $-9870,0983 \text{ kcal mol}^{-1}$ . Neste trabalho foram realizados estudos de modelagem molecular para caracterização inicial e a otimização da estrutura do ácido gama-aminobutírico (GABA), propondo assim uma estrutura mais eficaz, obtendo como passo inicial para estudo de “docking” molecular, fomentando assim a utilização farmacológica do GABA.

**Palavras-chave:** Ácido gama-aminobutírico. MEP. Hartree-Fock.