



BIOCATÁLISE EM ÁGUA-DE-COCO: EXPLORANDO TERPENOIDES PARA DESENVOLVIMENTO DE COMPOSTOS ANSIOLÍTICOS EM ZEBRAFISH ADULTOS (ABORDAGEM IN VIVO E IN SILICO)

Pitra Pedro José Lopes¹

Pedro Paulino João²

Joseano João André Rodrigues³

Maryan Angelica Seixas Ayran⁴

Aluiso Margues Da Fonseca⁵

RESUMO

A biocatálise representa uma tecnologia biotecnológica sustentável que utiliza enzimas ou microrganismos para catalisar reações químicas em condições mais brandas que métodos convencionais, oferecendo vantagens ambientais e econômicas significativas na produção de compostos bioativos. O zebrafish (*Danio rerio*) tornou-se o modelo animal preferencial na pesquisa biomédica devido às suas características excepcionais, desenvolvimento acelerado, transparência embrionária, facilidade de manutenção e notável similaridade genética com humanos. A caracterização de compostos bioativos utiliza técnicas complementares fundamentais. A Teoria do Funcional da Densidade (DFT) constitui uma ferramenta computacional poderosa para calcular propriedades eletrônicas moleculares, fornecendo informações sobre orbitais HOMO e LUMO, reatividade química e estabilidade molecular. Paralelamente, a espectroscopia no infravermelho oferece caracterização analítica através da identificação de grupos funcionais mediante absorção de radiação eletromagnética. O estudo implementou uma abordagem computacional integrada para caracterizar monoterpenos (di-hidrocarvona e carvona) obtidos por biocatálise em água-de-coco. As estruturas moleculares foram inicialmente construídas no software Avogadro e otimizadas utilizando o método de força universal. Subsequentemente, aplicou-se a Teoria do Funcional da Densidade com funcional B3LYP e conjunto de base def2-TZVP no software ORCA 6.0.1. Utilizou-se o software iboview para analisar a estrutura eletrônica molecular baseada em Orbitais Atômicos. Os cálculos DFT revelaram propriedades eletrônicas distintivas entre os monoterpenos estudados. A di-hidrocarvona apresentou energia HOMO de -0,2668 unidades atômicas e LUMO de -0,2584 unidades atômicas, enquanto a carvona exibiu HOMO de -0,2417 unidades atômicas e LUMO de -0,0217 unidades atômicas. A análise dos orbitais de fronteira demonstrou localização do HOMO em regiões nucleofílicas moleculares, com o LUMO representando áreas de maior caráter eletrofílico. Os espectros infravermelhos teóricos confirmaram as estruturas propostas, evidenciando absorções características específicas: estiramentos (C-H) na região espectroscópica 3100-2800 cm^{-1} , grupos carbonila entre 2000-1700 cm^{-1} e ligações (C=C) alifáticas na faixa 1700-1450 cm^{-1} . A carvona mostrou padrão espectroscópico similar com absorções identificadas em 3300-2800 cm^{-1} para estiramentos (C-H), 2000-1700 cm^{-1} para carbonila e 1600-1500 cm^{-1} para duplas ligações (C=C) alifáticas. O estudo comprovou definitivamente a eficácia dos métodos computacionais DFT na caracterização estrutural e eletrônica de monoterpenos bioativos derivados de processos biocatalíticos em água-de-coco. Os resultados obtidos estabelecem fundamentos científicos sólidos para investigações futuras sobre o potencial ansiolítico destes compostos em modelos experimentais zebrafish. Agradeço ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo financiamento da pesquisa intitulada: Biocatálise em água-de-coco: Explorando terpenoides para desenvolvimento de compostos ansiolíticos em Zebrafish adultos (abordagem in vivo e in silico), executada entre 01/09/2024 e 31/08/2025.

Palavras-chave: Biocatálise; Monoterpenos; Teoria do Funcional da Densidade; Espectroscopia IR.

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Discente, pitralopes1996@gmail.com¹

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Discente, pedrojo@aluno.unilab.edu.br²

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Discente, jjoseano58@gmail.com³

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Discente, maryan@aluno.unilab.edu.br⁴

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Docente, aluisiomf@unilab.edu.br⁵