

**208-047**

**CARACTERIZAÇÃO DA MOLÉCULA VARFARINA USADA NO TRATAMENTO DA TROMBOSE**

Gonçalves, R.O.(1); Braga, A.S.(1); Gonçalves, R.O.(1); Nascimento, L.R.(1); Silva, C.D.(1); Pinheiro, J.A.(1); Fonseca, M.O.(1); De Oliveira, M.R.(2);

Universidade Estadual do Ceara(1); Universidade Estadual do Ceara(2); Universidade Estadual do Ceara(3); Universidade Estadual do Ceara(4); Universidade Estadual do Ceara(5); Universidade Estadual do Ceara(6); Universidade Estadual do Ceara(7); Universidade Federal Rural do Semi-Arido(8);

O princípio ativo Varfarina, é um anticoagulante que atua inibindo os fatores de coagulação e pode ser usada no tratamento da trombose e, ao mesmo tempo, evitar a ocorrência de sangramento espontâneo. Mediante a importância biológica da Varfarina, utilizamos um software, Arguslab®, para fazer a caracterização da matéria, como etapa necessária para futuros estudos de modificação estrutural, com intuito de otimizar a ação deste medicamento, e futuramente a descoberta de novo fármaco com mesmas propriedades benéficas. A estrutura da substância Varfarina foi obtida no repositório ChemSpider(<http://www.chemspider.com/>). Foram realizados os cálculos semi-empírico e obtidos as coordenadas atômicas da molécula, Mapa de potencial eletrostático (MEP) e Orbitais moleculares de fronteira para a Varfarina no software Arguslab. O estudo in silico da otimização do fármaco Varfarina teve como base o princípio de minimização de energia onde foi possível obter uma conformação de potencial energético igual a -90708.2011 kcal/mol. Os dados obtidos neste estudo poderão, posteriormente, ser utilizados em estudos futuros de análise estrutural e conformacional.