POSTER SESSIONS

SESSION 1 – MONDAY, OCTOBER 29

SYNTHESIS AND PHARMACOLOGICAL ACTIVITY

Code **Title**

OSPS-01 **Chiral xanthones as inhibitors of inflammation target enzymes: Synthesis, biological evaluation and molecular docking**

Fernandes, C[1,2]; Palmeira, A. [1,2]; Carneiro, C.[1,2]; Tiritan, E.[1,3]; Ramos, I.[1,2]; Pinto, P.[4]; Lucio, M.[4]; Saraiva, L.[4]; Reis, S.; Pinto, M.[1,2]*

[1]Centro de Química Medicinal da Universidade do Porto (CEQUIMED-UP), Portugal. [2]Laboratório de Química Orgânica e Farmacêutica, Universidade do Porto, Portugal. [3]Centro de Investigação em Ciências da Saúde, CICS-ISCS-N, Portugal. [4]REQUIMTE, Faculdade de Farmácia, Universidade do Porto, Portugal.

OSPS-02 **Antichagasic and Cytotoxic Evaluation of Semicarbazones Derivatives as Potential Drug Candidates**

Santos A. V.[1*]; Maimoni, J. V.[1]; Junior, L. S.[1]; Souza, M. I.[1]; Silva J. D.[1]; Pereira, V. R.[2]; Brondani D. J.[1].

[1]Laboratório de Planejamento Avaliação e Síntese de Fármacos –LABSINFA; [2] CPqAM, FIOCRUZ, Pernambuco.

OSPS-03 **Synthesis of new triazole arotinoid analogues via "Click Chemistry" with potential anticancer activity**

Garcia, T. M.[1]; Aleixo, M. A. A.[1]; Cassamale, T. B.[1]; Lourenço, L. D.[1]; Carvalho, D. B.[1]; Viana, L. H.[1]; Hurtado, G. R.[1]; Matos, M. F. C.[1]; Kadri, M. C. T.[1]; Guerrero Jr., P. G.[2]; Baroni, A. C. M.[1*]

[1]LASQUIM, UFMS, MS, Brazil. [2]DAQBi, UTFPR, PR, Brazil.

OSPS-04 **Evaluation cytotoxic of derivative of thiophene in HELA, PC3 and CHO cells**

Aguiar, A. C. V.[1*]; Câmara, R. B. G.[1]; Rocha, H. A. O.[1]; Moura, R.O.[2]; Junior, F.M.[2]; Carvalho, M. S.[3]

[1]Centro de Biociências, UFRN, Brasil. [2]Centro de Ciências Biológicas e da Saúde, UEPB, PB, Brasil. [3]Centro de Biociências, UFRN, Brasil.

OSPS-05 **Synthesis and Antifungal Activity of 2-aryl-3-(piperidin-1-yl)ethylthiazolidinones**

Kunzler, A.[1*]; Marques, G.H.[2]; Nascente, P.S.[2]; Difabio, R.[1]; Berwaldt, G.A.;[1] Siqueira, G.M.;[1] Cunico, W.[1*]

[1]Núcleo de Química Aplicada. CCQFA, UFPel. [2]Laboratório de Micologia, UFPel.

OSPS-06 **Synthesis and antioxidant activity of 2-aryl-3-(piperidin-1-yl)ethylthiazolidinones**

Gouvêa, D.P[1].; Kunzler, A.[1*]; das Neves, A.M.;[1] Saccon, T.D.[2]; Dutra, F.S.P.[2]; Stefanello, F.M.[2]; Cunico,W.[1*]

[1]NuQuiA, CCQFA, UFPel. [2] Laboratório de Biomarcadores, CCQFA, UFPel.

OSPS-07 **Antioxidant effect of the compound 7-chloro-4-phenyltellanyl-quinoline in structures brain of the mice**

*Vieira, A. I.[1,3]; Castro, M.[1,3]; Seus, N[1]; Goldani, B. S.[1]; Alves, D.[1]; Savegnago, L.[2,3]
[1]Laboratório de Síntese Orgânica Limpa - LASOL - UFPel - Brazil. [2] Grupo de Pesquisa em Neurobiotecnologia (GPN), UFPel - Brazil.

OSPS-08 **Synthesis and antimicrobial activity of diphenylmethyl substituted halogenated heterocycles**

Souto, A. A.*; Malavolta, J. L.; Flores, A. F. C.; Alves, S. H.; Goularte, R. B.
Núcleo de Química de Heterociclos, UFSM, RS.

OSPS-09 **Synthesis and Anti-T. cruzi Evaluation of Arylthiosemicarbazones**

Oliveira, A.D.[1*]; Espíndola, J.W.[1]; Gomes, P.A.T.[1]; Barbosa, M.O.[1]; Moreira, D.R.[1]; Leite, A.C.[1]; Brondani, D. .[2]; Oliveira, A.P.[3]; Oliveira, B.C.[3]; Neves, J.K.A.[3]; Pereira, V.R.A.[3].
[1]LpQM - UFPE . [2]LabSinfa – UFPE; [3]CPqAM, FIOCRUZ, Recife, PE.

OSPS-10 **Antifungal activity against Candida albicans of organotin compounds derived from carboxylate ligands**

Barbosa, A. S. L.[1*]; Guedes, J. S.[1]; Bastos, M. L. A.[2]; Meneghetti, M. R.[1]
[1]IQB, UFAL. AL, Brasil. [2]Escola de Enfermagem e Farmácia. UFAL, AL, Brasil.

OSPS-11 **FPY-3, a new N-benziltiazolidine derivative with an atypical antipsychotic profile, protects against the excitotoxicity**

Betti, A.H.[1,4*]; Fraga, C.A.M.[3]; Barreiro, E.[3]; Do Rego, J.L.[4]; Do Rego, J.C.[4]; Lima, M.C.A.[2]; Galdino, S.[2]; Pitta, I.[2]; Rates, S.M.K.[1], Vaudry, D.[4]
[1]PPGCF, UFRGS; [2]GPIT, UFPE; [3]LASSBio, UFRJ; [4]INSERM U982, Université de Rouen, França.

OSPS-12 **Chiral Epoxy-α-acyloxycarboxamides as Inhibitors of Cathepsins K, L and V**

Deobald, A. M.;* Ávila, R. M. D.; Vieira, P. C.; Paixão, M. W.; Corrêa, A. G.
Department of Chemistry, UFSCar, São Carlos, SP, Brazil.

OSPS-13 **Synthesis and analgesic activity of new N-acylhidrazone derivates planned as new compounds to treat sickle cell disease**

Svendsen, A. F.*[1]; Ercolin, L. R.[1]; Rosseto, L. A.[1]; Chelucci, R. C.[1]; Mota R. M.[1]; Cerecetto H.[2]; Gonsalez, M.[2]; Chung, M.C.[1]; Santos, J. L.[1]
[1]School of Pharmaceutical Science, UNESP, Brazil. [2]School of Chemistry, University of the Republic – Uruguay

OSPS-14 **Synthesis and biological evaluation of novel quinoline derivatives against Plasmodium falciparum**

Carvalho, A. S.[1]; Boechat, N.[1*] Aguiar, A. C. C.[2,3]; Krettli, A. U.[2,3]
[1]Instituto de Tecnologia em Fármacos, Farmanguinhos, FIOCRUZ, RJ, Brazil. [2]Laboratório de Malária, Instituto de Pesquisas René Rachou, FIOCRUZ, MG, Brazil. [3]PPGMM. Faculdade de Medicina. UFMG, MG, Brazil.

OSPS-15 **Synthesis and antioxidant properties of NO donor derivatives designed as antichagasic compounds**

*Bosquesi, P.L[1].; Oliveira, J.R.S[1].; Melo, T.R.F[1].; Fachin, J.P.O[1].; Silva, F.A.J[1].; Santos, J.L[1].; Chung, M.C[1].
[1]School of Pharmaceutical Science, UNESP, Araraquara, Brazil.

OSPS-16 Evaluation of the inhibitory activity of pathogenic yeasts in a new class of synthetic hydrazones

Casanova, B. B[1*].; Muniz, M. N[1].; Fuentefria, A. M[2].; Gosmann, G[1].; Gnoatto, S. C. B[1].;
[1]Laboratório de Fitoquímica e Síntese Orgânica, UFRGS, RS, Brazil. [2]Laboratório de Micologia Aplicada, UFRGS, RS, Brazil.

OSPS-17 Pharmacokinetic study of ascorbic acid in post-confluent differentiated CaCo-2 cells

Costa, C.S.C.*; Guimarães, T.T.; Pedrosa, C.; Rocha-Leão, M.H.; Pierucci, A.P.T.R.
UFRJ, RJ, Brazil

OSPS-18 Antinociceptive mechanism of the hydantoin IM-7 does not involve GABAA receptors nor KATP channels pathways

Carvalho, F.L.[*1]; Fonsêca, D.V.[1]; Salvadori, M.G.S.S.[1]; Penha, A.R.S.[1]; Salgado, P.R.R.[1]; Braga, R.M.[1]; Paulo, L.L.[1]; Figueiredo, D.A.F.[1]; Souza, S.A.[2]; Athayde-Filho, P.F.[2]; Almeida, R.N.[1]
[1] Laboratório de Psicofarmacologia, UFPB, Paraíba, Brazil. [2]Departamento de Química, UFPB, Paraíba, Brazil.

OSPS-19 Antibacterial and cytotoxic activity of novel compounds Triazenes complexed with gold (I).

Kempfer, C. B.[*1]; Horner, R.[1]; Tizotti, M. K.[1]; Sousa, L. U.[1]; Zambiazi, P. J.[2]; Nunes, M. S.[1]; Horner, M.[2]
[1]UFSM, Departamento de Análises Clínicas e Toxicológicas, RS, Brasil. [2]UFSM, Departamento de Química, RS, Brasil.

OSPS-20 Synthesis of some Piperazine Derivatives with Potential Activity against Tuberculosis

Costa, C.F.[1]; Ornelas, D.[1,2]; Facchinetti, V.[1]; Lourenço, M.C.S.[3]; de Souza, M.V.N.[1]; Vasconcelos, T.R.A.[2]; Gomes, C.R.B.[3,*]
[1-]Fiocruz/Farmanguinhos, RJ, Brazil. [2-]UFF, IQ/GQO, RJ, Brazil. [3-]Fiocruz/IPEC, RJ, Brazil.

OSPS-21 Fatty acid amides: potent inhibitors of cancer cell proliferation

Santos, D. S.;[1*] Rodrigues, M. O.;[1] Piovesan, L. A.;[1] D'Oca, M. G. M.;[1] Ruiz, A. L. T. G.;[3] Carvalho, J. E.[3]
[1]Laboratório Kolbe de Síntese Orgânica – FURG, RS. [2]Laboratório de Síntese Orgânica – UFRGS, RS. [3]Centro Pluridisciplinar de Pesquisas Químicas, Biológicas e Agrícolas – Unicamp, SP.

OSPS-22 Thiazolidinones from 2-picolilamine: Sonochemical synthesis andantioxidant activity.

Bosenbecker, J.;[1] Gouvêa, D.P.;[1*] Bareño, V.D.O.;[1] Oliveira, P.S.;[2] Dutra, F.S.P.;[2] Stefanello, F.M.;[2] Barschak, A.G.;[2] Cunico W.[1*]
[1]NuQuiA – Núcleo de Química Aplicada, CCQFA, UFPel [2]Laboratório de Biomarcadores,

CCQFA, UFPel.

OSPS-23 **Cytotoxicity and potential antiparasitic and immunomodulatory of molecules thiazole and phtalil-thiazole**

Santiago, E. F[*,1]; Oliveira, R. A.[1]; Gomes, P. A. T. M.[1]; Espíndola, J. W. P.[1]; Barbosa, M. O.[1]; Silva, E. B.[1]; Moreira, D. R. M.[1]; Pereira V. R. A.[2]; Silva, A. C.[2]; Santos, T. A. R.[2]; Souza, V. C. A.[3]; Oliveira, S. A.[3]; Leite, A. C. L.[1.]
[1]Laboratory of Planning and Medicinal Chemistry - UFPE, PE, Brazil; [2]Department of Immunology - CpqAM/FIOCRUZ, PE, Brazil; [3]Laboratory of immunopathology - CpqAM/FIOCRUZ, PE, Brazil.

OSPS-24 **Synthesis of new thiosemicarbazones: Insecticide larval candidates planned by strategic bioisosterism**

Silva, E. B.[1]; Cardodo, M. V. O.; Espíndola, J. W. P.[1]; Navarro, D. M. A. F.[2]; Oliveira, A. R.; Moreira, D. R. M.[1]; Siqueira, L. R[1]; Oliveira, G. B. [1]; Leite, A. C. L.[1*;]
[1]Department of Pharmaceutical Sciences, CCS, UFPE, PE. [2]DQF, CCEN, UFPE.

OSPS-25 **Synthesis of cyclohexylethylphosphocholine - a novel miltefosine analogue**

Lima, E.J.C.[*]; Tanabe, C.A.Y.; Sá, M.M.; Rangel-Yagui, C.O.
Department of Pharmaceutical Sciences, USP, SP, Brazil.

OSPS-26 **Regioselective synthesis and antimicrobial evaluation of new 1-aryloxyacetyl, 1-thiophenoxyacetyl- and 1-phenylaminoacetyl-substituted 3-alkyl(aryl/heteroaryl)-5-trifluoromethyl-5-hydroxy-4,5-dihydro-1H-pyrazoles**

Pittaluga, E. P.; Bonacorso, H. G.[*]; Alves, S. H.; Schaffer, L. F.; Cavinatto, S.; Porte, L. M. F.; Paim, G. R.; Junges, A. F.; Moraes, M. C.; Martins, M. A. P.; Zanatta, N.
Núcleo de Química de Heterociclos (NUQUIMHE), UFSM, RS, Brazil.

OSPS-27 **Design of new snake venom metalloproteinase BaP1 inhibitors**

Villalta-Romero, F.[1]; Gutiérrez, J. M.[2]; Pérez-Payá, E.[3]; Espíndola, A. P.[1]; Tasic, L.[1*]
[1]Instituto de Quimica, UNICAMP, Brasil; [2]Instituto Clodomiro Picado, Universidad de Costa Rica, Costa Rica; [3]Centro de Investigación Príncipe Felipe

OSPS-28 **(ClCH2)2Mg.LiCl: An Efficient Reagent for the Synthesis of Chlorohydrins.**

Toledo, F. T.; Nishimura, R. H. V.; Lopes, J. L. C.; Clososki, G. C.[*]
FCFRP – Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto – SP –Brazil

OSPS-29 **Antileishmanial activity and cytotoxicity of benzaldehyde-thiosemicarbazones derivates from S-(-)-limonene.**

Vandresen, F.[1]; Almeida, S. A.[1]; Falzirolli, H.[1]; Alves, V. G.[1]; Britta, E.[2]; Nakamura, C. V.[2]; Silva, C. C.[1*]
[1]Universidade Estadual de Maringá. Fitosin-Departamento de Química. [2]Universidade Estadual de Maringá, Departamento de Ciências Básicas da Saúde. PR, Brazil.

OSPS-30 **New heterogeneous palladium catalyst in Dynamic Kinetic Resolution of -methylbenzylamine**

Labussiére, G. M.; Domingues, F. S.; de Lima, S. M.; Siqueira, F. A.[*]
Instituto de Ciências de Ciências Ambientais, Químicas e Farmacêuticas – UFSP,

Diadema. SP, Brasil.

OSPS-31 **Design, synthesis and pharmacological evaluation of novel acetylcholinesterase Inhibitors designed as new drug candidate prototypes for the treatment of Alzheimer's disease**

F. P. D. Viegas[1,2], M. F. Silva[1], M. M. Riquiel[1], F. C. Vilela[3], L. Orlandi[3], A. Giusti-Paiva[3], N. G. Castro[4], T. F. M. Areas[4], F. M. R. Silva [4]; C. Viegas Jr[*1,2]
[1]LFQM - Laboratório de Fitoquímica e Química Medicinal, UNIFAL, MG, Brazil. [2]PPGQ, UNIFAL -MG, Brazil. [3]Laboratório de Ciências Fisiológicas, UNIFAL, MG, Brazil. [4]Laboratório de Farmacologia Básica e Clínica, UFRJ, RJ, Brazil.

OSPS-32 **Antifungal Evaluation of Heterocyclic Thiazolidinones**

Marques, G.H.;[1*] Kunzler, A.;[2] Bareño, V.D.O.;[2] Cunico, W.;[2] Silva, V.L.;[1] Nascente, P.S.[1]
[1]Laboratório de Micologia, Instituto de Biologia, UFPel. [2]NuQuiA - Núcleo de Química Aplicada, CCQFA, UFPel.

OSPS-33 **Analysis by Quantum Mechanical of the Inhibition of NS3-NS2B protease for peptide-based inhibitor**

Ourique, G. S.[1*], Lima Neto, J. X.[1], Oliveira, J. I. N.[1], Fulco, U. L.[1], Freire, V. N.[2], Albuquerque, E.L.[1]
Department of Biophysics e Pharmacology (DBF), UFRN. [2]Department of Physics, UFC.

OSPS-34 **Allylic thiocyanates as a new class of antitubercular agents**

G. P. Silveira[a], M. Ferreira[b], L. Fernandes[c], G. C. Moraski[d], Sa. Cho[e], S. G. Franzblaue, M. M. Sáb,*
[a]Instituto de Química, UFRGS/RS, Brazil. [b]Departamento de Química, UFSC/SC, Brazil. [c]Coordenação de Engenharia Química, UTFP/PR, Brazil. [d]Department of Chemistry and Biochemistry, University of Notre Dame, USA. [e]Institute for Tuberculosis Research, College of Pharmacy, University of Illinois at Chicago, USA.

OSPS-35 **8-Hydroxyquinoline Schiff-bases as Therapeutics for Alzheimer's Disease: physicochemical properties and in vitro biological screening**

Gomes, L. M. F.[1]; Vieira, R. P.[1]; Jones, M.[2]; Da Silva, J. G.[1]; Orvig, C.[3]; Storr, T.[2*]; Beraldo, H.[1*]
[1]Departamento de Química, UFMG, MG, Brasil. [2]Department of Chemistry, Simon Fraser University, Canada. [3]Department of Chemistry, University of British Columbia, Canada.

OSPS-36 **Synthesis and in vitro anti Mycobacterium tuberculosis activity of furoxan and benzofuroxan derivatives**

Santos, J.L.[*1]; Pavan, F.R.[1]; Souza, P.C.[1]; Barros, H.B.; Silva, M.; Leite, C.Q.F.; González, M.[2]; Chung, M.C.[1]; Cerecetto, H.[2]
[1]UNESP, School of Pharmaceutical Science, Araraquara, SP, Brazil [2] Universidad de la República, Facultad de Química, Montevideo, Uruguay.

OSPS-37 **Synthesis and antimicrobial activity of parabens derivatives**

Fernandes, J. P. S.[1*]; Savino, G.[1]; Amarante, A. C. G.[1]; Correa, M. F.[2]; Ferrarini, M.[2]
[1]Centro de Ciências Biológicas e da Saúde, Universidade Presbiteriana Mackenzie;

[2]Centro Universitário São Camilo.

OSPS-38 **Synthesis, Antifungal Activity and SAR of 2-imino-4-thiazolidinone Derivatives**

Campos Jr, J.C.[1*]; Bierhals, M.P.[1]; Kunzler, A.[1]; Nascente, P.S.[2]; Cunico, W.[1]; Siqueira, G.M.[1];
[1]Núcleo de Química Aplicada. CCQFA, UFPel. [2]Laboratório de Micologia, UFPel.

OSPS-39 **Hydrazones: inhibitors of acetylcholinesterase?**

Petronilho, E. C.[1]; Castro, N. G.[2]; Silva, F. M. R.[2]; Pinto, A. C.[3]; Figueroa-Villar, J. D.[1*]
[1]Medicinal Chemistry Group, Department of Chemistry, IME, Brazil. [2]Biomedical Science Institute, UFRJ, Brazil.[3]Institute of Chemistry, UFRJ, Brazil.

OSPS-40 **Thiosemicarbazones as Potent Larval Insecticides**

Espíndola, J. W. P.[*2]; Oliveira, A. D. T.[2]; Silva, E. B.[2]; Oliveira, A. R.[2]; Moreira, D. R. M.[2] ; Navarro, D. M. A. F.[1]; Leite, A. C. L.[2]; Brondani, D. J.[2] ; Santos, T.A.R.[3]; Silva, A.C.[3] ; Rocha, L.F.[3]; Pereira, V. R. A[.3]
[1]DQF, CCEN, UFPE, Recife. [2]Department of Pharmaceutical Sciences, CCS, UFPE, PE. [3]CPqAM, FIOCRUZ, PE.

OSPS-41 **Design, Synthesis and Biological Evaluation of Sulfur-Containing 1,1-Bisphosphonic Acids against Parasitic Diseases**

Szajnman, S. H.;[1] Recher, M.;[1] Barboza, A. P.;[1] Li, Z.-H.;[2] Galizzi, M.;[2] Ferrer-Casal, M.;[1] Docampo, R.; [2]Moreno, S. N. J.; [2] Rodriguez, J. B.[1,*]
[1]Departamento de Química Orgánica and UMYMFOR (CONICET–FCEyN), Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA, Argentina; [2]Center for Tropical and Emerging Global Diseases and Department of Cellular Biology, University of Georgia, USA

OSPS-42 **Mycobacterium tuberculosis histidinol dehydrogenase (EC 1.1.1.23): Synthesis, inhibition and docking studies of novel hydrazones derived from L-histidine**

Lunardi, J.[1,2,3*]; Nunes, J.E.S.[2]; Raupp, A. S.[2,3]; Rostirolla, D. C.[3]; Timmers, L. F. S. M.[1,4]; Souza, O. N.[1,4]; Basso, L. A.[1,2,3]; Machado, P.[1,3]; Santos, D. S.[1,2,3.*]
[1]PPG Biologia Celular e Molecular, PUCRS, Brazil. [2]Quatro G Pesquisa & Desenvolvimento LTDA – TECNOPUC, RS, Brazil. [3]Centro de Pesquisas em Biologia Molecular e Funcional, INCT em Tuberculose, PUCRS, RS, Brazil. [4]Laboratório de Bioinformática, Modelagem e Simulação de Biossistemas, PUCRS– RS, Brazil.

OSPS-43 **Synthesis of alkylphosphocholines potentially less hemolytic than the drug Miltefosine**

Pachioni, J. A.[1*]; Magalhaes, J. G.[1]; Parise - Filho, R.[1]; Yagui, C. O. R[1 *]
[1]USP– Faculdade de Ciências Farmacêuticas –Cidade Universitária.

OSPS-44 **Assessment of genotoxic effect of α-(phenylselanyl) acetophenone by the comet assay in mice leukocytes**

Gerzson, M. F. B.[1]*; Martinez, D. M.[2]; Casaril, A.[1]; Ricordi,V.G.[2]; Alves, D.[2]; Savegnago, L.[1]
[1]Centro de Desenvolvimento Tecnológico-CDTec, Grupo de Pesquisa em Neurobiotecnologia (GPN), UFPel, Brazil. [2]PPGQ, Laboratório de Síntese Orgânica

Limpa - LASOL - UFPel - Brazil.

OSPS-45 **Synthesis, structural characterization and study of leishmanicidal activity of carboxylates complexes of antimony (V).**

Melo, G.M.A.[1]*; Queiroz, A.C.[2]; Omena, R.J.M.[1]; Dias, T.M.F.[2]; Alexandre-Moreira, M.S.[2]; Meneghetti, M.R.[1].
[1]Group of Catalysis and Chemical Reactivity (GCaR) – IQB – UFAL. [2]Laboratory of Pharmacology and Immunology (LaFI) –ICBS – UFAL.

OSPS-46 **Kinetics studies and molecular docking of tacrine analogs towards cholinesterases**

Terra, B.S.[1]; de Aquino, R.A.N.[1], da Silva, D.L.[1]; Modolo, L.V.[2], de Fátima, A.[1]
[1]Grupo de Estudos em Química Orgânica e Biológica (GEQOB), ICEx, UFMG, MG.[2]Grupo de Estudos em Bioquímica de Plantas (GEBioPlan), ICB, UFMG, MG,31279.

OSPS-47 **Determination of Cl_{50} acridine isoquinoline derivatives.**

Serafim, V. L.[1]; Monteiro, M. B.[1]; Pitta, I. R. [2]; Lima, M. C. A.[2]; Moura, R. O.[1]*.
[1]Departamento Ciências Biológicas, UEPB, PB, Brasil. [2]Departamento de Antibióticos, UFPE, PE, Brasil.

OSPS-48 **Synthesis and Antitumor Activity in vitro of acridine derivatives.**

Serafim, V. L.[1]; Lima, M. C. A[2]; Pitta, I. R.[2]; Moura, R. O.[1]*.
[1]Departamento Ciências Biológicas, UEPB, PB, Brasil [2]Departamento de Antibióticos, UFPE, PE, Brasil.

OSPS-49 **Synthesis of coumarin derivatives starting from phenolic compounds with potential anti- Trypanosoma cruzi activity**

Nascimento, F.G.[1]; Silveira, E.S.[1]; Vianna, D.R.[1]; Birriel, E.[2]; Varela, J.[2]; González, M.[2]; Cerecetto, H.[2]; Eifler-Lima, V.L.[1]
[1]LaSOM/Laboratório de Síntese Orgânica Medicinal, UFRGS, RS; [2]Grupo de Química Medicinal, Facultad de Ciencias-Facultad de Química, UdelaR.

OSPS-50 **Synthesis and in vitro antitumor activity of cycloalkyl[b]thiophene derivatives**

Dantas, N.[1], Luna, I. S.[1]; Monteiro, M. B.[1]; Gonçalves-Silva, T.[2], Mendonça Jr, F. J.[1]*
[1]Laboratório de Síntese e Planejamento de Fármacos, PB, Brazil, [2]Departamento de Antibióticos, UFPE, PE, Brazil.

OSPS-51 **Synthesis of new structural analogues of harmane and their inhibitory activity of cholinesterases**

Nogueira, M. C. O[1]; Kummerle, A. E. [1]; Junker, J.[2]; Rumjanek, V. M.[1];
[1]Departamento de Química, UFRRJ, Brazil. [2]FIOCRUZ - Manguinhos, RJ, Brazil

OSPS-52 **Synthesis and evaluation of novel antileishmanial compounds**

de Lima, E. C[1]; Branco, F. S. C.[1,2] ; Pinto, E. G.[3]; Tempone, A. G.[3] ; Pinto, A. C.[2]; Boechat, N.*[1];
[1]FIOCRUZ – Farmanguinhos - Departamento de Síntese Orgânica – Lab. Síntese 1. [2]UFRJ - IQ. [3]Instituto Adolfo Lutz, Centro de Parasitologia e Micologia, SP

OSPS-53 **Biological assessment and molecular modeling of N-phenyl-thiadiazolium phenylamine salts ascholinesterase inhibitors**

Linhares, P. C.; Lira, A.F.; Ferreira, W.S.; Silva, D.R.; Sant`Anna, C.M.R.; Echevarria, A.; Lima, M. E. F.; Rumjanek, V. M.
UFRRJ, ICE, Departamento de Química.

OSPS-54 **Synthesis and Antimalarial Activity of Primaquine-Thiazolidinone Derivatives.**

Neuenfeldt, P.D.;*[1,3] Drawanz, B.B.;[1] Bosenbecker, J.;[1] Aguiar, A.C.C.;[2] Krettli, A.U.;[2] Cunico, W.[1]
[1]NuQuiA - Núcleo de Química Aplicada, CCQFA, UFPel. [2]Centro de Pesquisas René Rachou-Fiocruz, Laboratório de Malária. [3]Laboratório de Estrutura e Atividade, Departamento de Química, UFSC.

OSPS-55 **Esterification Approaches to the Hept-1-en-4-yl 5-acetoxyHept-6-enoate, a Key Intermediate in the Synthesis of (-)-Putaminoxin**

Vassiliades, S. V.*; Monteiro, P. H.; Bianco, G. G.; Longo Jr., L. S.†
Instituto de Ciências Ambientais, Químicas e Farmacêuticas – UFSP, SP, Brazil.

OSPS-56 **Synthesis of novel paraconic acid analogs.**

Rodrigues, S. M. M.*; da Silva, Gil V.J., Constantino, M. G.
USP, Ribeirão Preto-SP, Brazil.

OSPS-57 **Binuclear palladium(II) compounds containing pyrazolato bridges: synthesis and antimycobacterial activity**

Franchi, S. J. S.[1]*; Da Silva, C.[1]; Cristante, V. M.[1]; Silva, P. B.[1]; Lemos, S. C.[1]; Netto, A. V. G.[1]; Mauro, A. E.[1]; Frem, R. C.[1]; Pavan, F. R.[2]; Souza, P. C.[2], Leite, C. Q.[2].*
[1]UNESP, Instituto de Química de Araraquara, SP-Brazil; [2]UNESP, Faculdade de Ciências Farmacêuticas, Araraquara-SP-Brazil.

OSPS-58 **Synthesis and Antimicrobial activity of a 5-substituted thiazolidine derivative**

Silva[1], I. M*.; Plastino[1], P. J.; Sena[1], K. X. F.; Albuquerque[1], J. F. C.
[1]Departamento de Antibióticos, UFPE, Pernambuco, Brazil.

OSPS-59 **Synthesis of γ-nitro esters: intermediates advanced to obtain pharmaceuticals Baclofen, Phenibut and Pregabalin**

Silva, J. C.[1]*, D'Oca, C.R.M.[1]; Moro, C. C.[1]; Russowsky, D.[1]
[1]Laboratorio de Sínteses Orgânicas, UFRGS.

OSPS-60 **New promising routes to natural and synthetic heterocyclic quinones**

Silva-Jr, P.E.*; Emery, F.S.
Faculty of Pharmaceutical Sciences of Ribeirão Preto, USP, SP, Brazil.

OSPS-61 **Anti-Candida, anti-enzyme activity and cytotoxicity of 3,5-diaryl-4,5-dihydro-1H pyrazole-1-carboximidamides**

Oliveira, S.G.[1*]; Pizzuti, L.[2]; Quina, F.H.[3]; Flores, A.F.[4]; Lund , R.G.[1]; Lencina, C.L.[5]; Pereira, C.M.[5]; Piva, E.[6]
[1]Laboratory of Microbiology, UFPel [2]Universidade Federal da Grande Dourados, MS, Brazil [3]IQ-NAP-PhotoTech, USP, SP, Brazil. [4]Department of Chemistry, UFSM, RS, Brazil.

[5]Laboratory of Bioative Heterocycles and Bioprospection (LAHBBio), UFPel. [6]Department of Restorative Dentistry, UFPel

OSPS-62 **Synthesis and pharmacological evaluation of enamine derivatives of diethyl ethoxymethylenemalonate (EMME)**

Valverde, S.S.[a,b], Souza, S.P.[a]*; Lima, A.B[a]; Oliveira, T.B.[b] Costa, F.N.[c]; Calheiros, A.S.[c]; Frutuoso, S.V.[c]; Figueroa-Villar, J.D.[a]. *

[a]Chemical Engineering Department, IME, RJ, Brazil. [b]Institute of Technology in Pharmaceuticals, FarManguinhos, FIOCRUZ, RJ, Brazil. [c]Immunopharmacology Laboratory, IOC, FIOCRUZ, RJ, Brazil.

OSPS-63 **Synthesis and antibacterial evaluation of phenanthrene derivatives**

Azeredo, S. O. F.*; Cruz, J. S.; Figueroa-Villar, J. D.
IME, Departamento de Engenharia Química.

OSPS-64 **Synthesis and evaluation of antinociceptive activity of natural products derivatives**

Souza, S.P.[a]*; Bastos-Lima, A.[a]; Valverde, S.S.[a,b]; Costa, N.F.[c]; Calheiros, A.S.[c]; Lima, K.S.[a]; Frutuoso, S.V. [c]; Figueroa-Villar, J.D.[a]; Lima, A.L.[a]. *

[a]Chemical Engineering Department, IME, RJ, Brazil. [b]Institute of Technology in Pharmaceuticals, FarManguinhos, FIOCRUZ, RJ, Brazil. [c]Immunopharmacology Laboratory, IOC, FIOCRUZ, RJ, Brazil.

OSPS-65 **Antitumor activity of LaSom 65, a Monastrol derivated compound, against gliomascell lines in culture**

Stuepp, C. S.[1]; Figueiró, F.[1]; Mendes, F. B.[1]; Jandrey, E.[1]; Braganhol, E.[1]; Bernardi, A.[1]; Frozza, R.[1]; Salbego, C.[1]; Canto, R. F. S.[2]; Russowsky, D.[3]; Eifler-Lima V. L.[2]; Battastini A. M. O.[1]*

[1]Departamento de Bioquímica, ICBS, UFRGS; [2]Laboratório de Síntese Orgânica Medicinal/LaSOM, UFRGS; [3]Instituto de Química, UFRGS, RS, Brasil.

OSPS-66 **New trifluoromethyl-containing (E)-N'-arylidene-[3-alkyl(aryl/heteroaryl)-4,5-dihydro-1H-pyrazol-1-yl]carbohydrazides: Synthesis and antioxidant activity.**

Cavinatto, S.; *Bonacorso, H.G.; Pittaluga, E. P.; Porte, L.M.; Navarini, J.; Stuker, C.Z.; Moraes, M.; Oliveira, L. M.; Paim, G.R.; Flores, A.F.; Martins, M.A.; Zanatta, N.
Núcleo de Química de Heterociclos (NUQUIMHE), UFSM, RS, Brazil.

OSPS-67 **Synthesis, NO-donor ability, analgesic and anti-platelet activity of new furoxanyl hybrid compounds**

*Melo, T.R.[1]; Chelucci, R. C.;[1] Bosquesi, P. L.[1]P; Pires, M. E.L.[2]; Marcondes, S.[2]; Chung, M.C.[1]; Santos, J.L[1]

[1]School of Pharmaceutical Science, UNESP, Araraquara, Brazil; [2]Pharmacology Laboratory, UNICAMP, Brazil

OSPS-68 **Synthesis and evaluation of the anticonvulsant activity of a dimeric palladium (II) complex, DIAZPdCl**

Barros, W.B.Z.[1]*; Reys, J.R.M.[2]; Sabino, F.S.[2]; Quintans-Júnior, L.J.[3]; Quintans, J.S.[3]; Santana, M.T.[3]; Meneghetti, M. R.[1]

[1]Instituto de Química e Biotecnologia (IQB). UFAL – AL, Brasil. [2]Escola de Enfermagem e Farmácia UFAL. AL, Brasil. [3]Departamento de Fisiologia. UFSE. SE, Brasil.

OSPS-69 **Synthesis and antineoplasic evaluation of novel naphthothiazepine derivatives**

Martínez, W.M.[1]*; Da Silva, P.H.[1]; Militão, G.C.[2]; Silva, R.O.[1]
[1]UFPE, Depto. de Química Fundamental, Brazil. [2]UFPE, Depto. de Fisiologia e Farmacologia, Brazil.

OSPS-70 **Design, synthesis and antimicrobial activity of furfuryliden derivatives against nosocomial pathogens**

Zorzi, R.R.*; Bortolozzo, L.S.; Jorge, S.D.; Palace-Berl, F.; Tavares, L.C.
Department of Biochemical and Pharmaceutical Technology, FCF/USP; FCF-USP, Butantã. São Paulo, SP.

OSPS-71 **Multicomponent synthesis of tetrahydropiridines derivatives with potential antimalarial activity**

Martins, L. M.; * da Silva, B. H. S. T.; Silva-Filho, L. C.
POSMAT - Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, Bauru-SP, Brazil.

OSPS-72 **Synthesis of side chain do construct derivatives of triterpenic compounds**

Maurício M. Victor[1,2*], Jorge M. David[1,2*], Maria C. Kuliakita[1,2*]
[1]Depto de Química Orgânica, IQ, UFBA, Salvador – BA, Brasil; [2]Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia/INCT em Energia e Ambiente, UFBA, BA, Brasil.

OSPS-73 **Synthesis of Modified Dipeptide containing 1,2,3-triazole group via "Click Chemistry" applicable to modified long chain peptides**

Lima*, M. M.; Carvalho, I.
Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto, USP.

OSPS-74 **Synthesis of new benzenesulfonamides as possible antimalarial prototypes**

Boechat, N.*; Ferreira, M. L. G.; Júnior, C. C. S.; Pinheiro, L. C. S.
Fundação Oswaldo Cruz, Instituto de Tecnologia em Fármacos, RJ, Brazil.

STRATEGIES IN DRUG DESIGN

Code **Title**

SDD-01 **Thermal analysis of new anti-inflammatory prodrugs without gastroulcerogenic effect**

Almeida, A.E.*[1]; Oliveira, E.V.[1]; Crespi, M.S.[2]; Santos, J.L.[1]; Chung, M.C.[1]
[1]UNESP, School of Pharmaceutical Science; [2]UNESP, Chemistry Institute.

SDD-02 **Molecular modeling studies of potential inhibitors of AgamOBP1 from Anopheles gambiae**

Affonso, R. S.*[1]; Guimarães, A. P.[1]; Oliveira, A. A.[1]; Slanna, G. B. C. A.[2]; França, T. C. C.[1]
[1]Laboratório de Modelagem Aplicada a Defesa Química e Biológica (LMDQB), Seção

de Engenharia Química, IME, RJ.[2]Curso de Farmácia, UFRJ, Campus Macaé.

SDD-03 **Leishmanicidal activity of a family of thiosemicarbazones and their antimony(III) complexes**

[1]*Queiroz, A.C.; [2]Reis, D.C.; [2]Ferraz, K.S.O.; [2]Parrilha, G.L.; [1]Araújo, M.V.; [1]Matta, C.B.B.; [1]Melo, G.M.A.; [3]Barreiro, E.J.; [2]Beraldo, H.O.; [1]Alexandre-Moreira, M.S.
[1]Laboratory of Pharmacology and Immunity– UFAl, Brazil; [2]Research Laboratory of Medicinal Inorganic Chemistry, UFMG, Brazil; [3]Laboratory of Synthesis and Evaluation of Bioactive Substances, UFRJ, Brazil.

SDD-04 **Cloning, expression, purification and characterization of Fumarate Hydratase from Schistosoma mansoni**

Luiz de Souza, A.*[1]; Pereira, HM[2], Nonato, M.C.[1]
[1]Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto, USP. [2]Instituto de Física de São Carlos, USP.

SDD-05 **Cheminformatics analysis of skin sensitization and permeability**

Alves, V. M.[1,2]; Muratov, E.[2]; Fourches, D.[2]; Andrade, C. H.[1]; Tropsha, A.[2]*
[1]Faculty of Pharmacy, UFGO, GO, Brazil. [2]Eshelman School of Pharmacy, University of North Carolina, NC, USA.

SDD-06 **Development of molecular targets models for PfHT by comparative modeling**

Fonseca, A.L.*[1]; Nunes, R.R. [1]; Comar Jr, M.[1]; Alves, R.J.[2]; Varotti, F.P.[1]; Taranto, A.G.[1].;
[1]Universidade Federal de São João del Rei - Campus CCO - MG.[2]UFMG-MG.

SDD-07 **Indatraline-based inhibitors of Trypanothione Reductase from T. cruzi: Investigation of binding modes by molecular docking studies**

Sodero, A. C. R.*; Freitas, C. A.; Souza, A. M. T.; Cabral, L. M.; Rodrigues, C. R.
[1]UFRJ, Faculty of Pharmacy, RJ, Brazil.

SDD-08 **Agonism and antagonism of the glutamatergic receptor iGluR2**

Martins, A.C.V. [1]*; Lima-Neto, P.[1]; Freire, V. N.[3]
[1]Departamento de Química Analítica e Físico-Química, UFC, Ceará. [2]Departamento de Física, UFCE, Ceará.

SDD-09 **Molecular modeling studies of Thymidylate Kinase from Variola virus**

Guimarães, A. P.*[1]; Ramalho, T. C. C[2].; França, T. C. C.[1]
[1]Laboratory of Molecular Modeling Applied to the Chemical and Biological Defense, IME, RJ, Brazil. [2]Chemistry Department, Federal University of Lavras, Brazil.

SDD-10 **Quantum Biochemistry Computations at the Development of Anticancer Drugs**

*Bezerra, E. M.[1]; da Costa, R. F.[2]; Saraiva, R. A.[3]; Nogara, P. A.[3]; Rocha, J. B. T.[3]; Martins, A. M. C.[1]; Caetano, E. W. S.[4]; Albuquerque, E. L.[5]; Freire, V. N.[2]
[1]Programa de Pós-Graduação em Ciências Farmacêuticas, UFC, CE, Brazil; [2]Departamento de Física, UFC, CE, Brazil; [3]Centro de Ciências Naturais e Exatas, Laboratório de Bioquímica Toxicológica, UFSM, RS, Brazil; [4]IFCE, CE, Brazil; [5]Departamento de Biofísica e Farmacologia, UFRN, Natal, RN, Brazil.

SDD-11 **NatProDB's expansion with chemical structures for the search of enzymes inhibitors for the Moniliophtera perniciosa.**

Souza, B. C. *; Santos, I. A.; Santos, G. C.; Santos Junior, M. C.; Duarte, A. A.
Laboratório de Modelagem Molecular - LMM, Universidade Estadual de Feira de Santana. Bahia, Brasil.

SDD-12 **Biotransformation as a useful tool in the search for new bioactive derivatives of beta-lapachone**

Paludo, C.R.*[1]; Silva-Junior, E.A.[1]; Santos, R.A.[2]; Pupo, M.T.[1]; Emery, F.S.[1]; Furtado, N. A. J. C.[1]
[1]Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto, Brazil. [2]Núcleo de Pesquisas em Ciências Exatas e Tecnológicas da Unifran, Brazil.

SDD-13 **QM/MM studies for organochlorine compounds with human estrogen receptors α and β**

Santana, C. S.[1,2]*; Cardoso, L. A. [1,2]; Leite, F. H. A.[2]; Santos, E. [1,2]; Santos Junior, M. C[2]
[1]Programa de Pós-Graduação em Recursos Genéticos Vegetais; [2]Laboratório de Modelagem Molecular (LMM); [1,2]Universidade Estadual de Feira de Santana, Bahia, Brasil.

SDD-14 **On the Discovery of New Non-peptidic Cruzain Inhibitors**

Wiggers, H. J.; Rocha, J. R.; Cheleski, J.; Montanari, C. A.*
Grupo de Química Medicinal do IQSC/USP. Instituto de Química de São Carlos. USP. São Carlos/SP.

SDD-15 **Docking Studies on the binding interactions between benzophenone derivatives and estrogen receptor**

Freitas, C.A.[1]*; Corrêa, B.A.M.[1]; Sodero, A.Cr.[1]; Souza, A.M.T.[1]; Castro, H.C.[2]; Cabral, L.M.[1]; Rodrigues, C.R.[1].
[1]UFRJ, Rio de Janeiro-RJ, Brazil. [2]UFF, Niterói-RJ, Brazil.

SDD-16 **Optimization of the expression and purification of recombinant rhodesain, a therapeutic target for African Sleeping sickness**

Coelho, P. L.[1]; Cruz, L. F.[1]; Fradico, J.[1]; Ferreira, R. S.[1]*.
[1]Departamento de Bioquímica e Imunologia do Instituto de Ciências Biológicas, UFMG, MG – Brasil .

SDD-17 **Comparing ACE inhibitors with quantum biochemistry computations**

*da Costa, R. F.[1]; Bezerra, E. M.[2]; A. M. C.; Martins, A. M. C[2]; Caetano, E. W. S.[3]; Cavada, B. S.[4]; Albuquerque, E. L.[5]; Freire, V. N[1].
[1]Departamento de Física, UFC, CE, Brazil; [2]Programa de Pós-Graduação Ciências Farmacêuticas, UFC, CE, Brazil; [3]Departamento de Bioquímica, UFC, CE, Brazil; [4]Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Ceará (IFCE), CE, Brazil; [5]Departamento de Biofísica e Farmacologia, UFRN, RN, Brazil.

SDD-18 **Molecular Modeling studies of Stereoeletronic Properties by chalcones and hydrazides antichagasic candidates**

Vital, D. G.*; Ferreira, E. I.; Trossini, H. G. G.;
Department of Pharmacy, Faculty of the Pharmaceutical Science, USP, SP, Brazil.

SDD-19 **Docking studies of potential inhibitors of dihydrofolate reductase from Coxiella burnetii.**

Souza, F. R.*[1]; Guimarães, A. P.[1]; Freitas, M. P.[2]; França, T. C. C.[1]
[1]Laboratory of Molecular Modeling Applied to the Chemical and Biological Defense, IME, RJ, Brazil. [2]Chemistry Department, Federal University of Lavras, Brazil.

SDD-20 **Inhibitors of Nucleoside Hydrolase of L. donovani as potential drugs for treatment of Visceral Leishmaniasis.**

Rennó, M.N;[1,2] França, T.C.C.;[1] Palatnik-de-Souza, C.;[3] Tinoco, L. W.;[4] Figueroa-Villar, J.D.[1]*
[1]Departamento de Química, IME, RJ. [2]Departamento de Farmácia, UFRJ, Macaé, RJ. [3]Instituto de Microbiologia, UFRJ, RJ. [4]Núleo de Pesquisa Produtos Naturais, UFRJ, RJ.

SDD-21 **2D- and 3D-QSAR studies for a series of oxadiazoles inhibitors of Schistosoma mansoni Thioredoxin Glutathione Reductase**

Filho, C.C.M.*; Neves, B.J.; Andrade, C.H.
Laboratório de Modelagem Molecular (LabMol), Faculdade de Farmácia, UFGO – GO, Brazil.

SDD-22 **Hypoglycemiant ribofuranosyl triazoles non-competitively inhibit glycosidases from GH13 family by binding to the substrate binding cleft**

Daltro, P. S.[1]; Ferreira, S. B.[2,3]; Kaiser, C. R.[2]; Ferreira, V. F.[4]; Senger, M. R.[1]; Silva-Jr, F. P.[1]*
[1]Fundação Oswaldo Cruz, Instituto Oswaldo Cruz, Laboratório de Bioquímica de Proteínas e Peptídeos, Brazil; [2]UFRJ, Instituto de Química, [3]UFRJ, Macaé, Brazil; [4]UFF, Instituto de Química, CEG, Brazil.

SDD-23 **Multiple complexation of cyclodextrin with soy isoflavones present in an enriched fraction**

Yatsu, F. K. J.[1]; Koester, L. S.[1]; Lula, I.[2]; Passos, J. J.[2]; Sinisterra, R.[2]; Bassani, V. L.[1]*
[1]Programa de Pós-Graduação Ciências Farmacêuticas, UFRGS, RS, Brazil. [2]Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, UFMG, MG, Brazil.

SDD-24 **Docking Study of Flavonoids Interaction with Snake Venom PLA_2 Binding Site**

Ferreira, F. B.*; Castro, R. N.; Sant'Anna, C. M. R.
Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, UFRRJ.

SDD-25 **SIMCA analysis for a set of active and inactive compounds against Leishmania major Pteridine reductase**

Leite, F. H. A[1,2]*; Freitas, H. F[1,2]; Teles, A. L. B[1,2]; Froes, T. Q [2]; Castilho, M. S.[2]
[1]Programa de Pós-graduação em Biotecnologia, Universidade Estadual de Feira de Santana; [2]Laboratório de Bioinformática e Modelagem Molecular, Faculdade de Farmácia, UFBA.

SDD-26 **Rational design of modified dipeptides as ACE inhibitors**

Gedder, D. S.; *[1] Freitas M. P.;[1] Cunha, E. F. F.;[1] Nunes, C. A.[2]
[1]Department of Chemistry, Federal University of Lavras, MG, Brazil; [2]Department of Food Science, Federal University of Lavras, MG, Brazil

SDD-27 **Identification of potential inhibitors of the UDP-N-acetylglucosamine pyrophosphorylase of the Moniliophthora perniciosa.**

Santos, G. C*; Santos Junior, M. C.; Leite, F. H. A.
Laboratório de Modelagem Molecular - LMM, Universidade Estadual de Feira de Santana – UEFS, Bahia, Brasil.

SDD-28 **Expression, Purification and Preliminary crystallographic studies of enzyme dihydroorotate dehydrogenase of Schistosoma mansoni**

Tomaleri, G. P.[1]*; Costacurta, J. S. D.[1]; Pádua, R. A. P.[1]; Pereira, H.M.[2]; Nonato, M. C[1].
[1]Laboratório de Cristalografia de Proteínas, Departamento de Física e Quimica, Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto, USP. [2]Instituto de Física de São Carlos, USP.

SDD-29 **Investigation of polymorphism of compound cpisoxthrough the determination of the structural properties.**

Silva, G. S.[1]*; Pereira, M. A.[1]; Frigo, L. M.[2]; Flores, A. F. C.[2];Balliano, T. L [1].
[1]Laboratório de Cristalografia e Modelagem Molecular (LabCriMM), Instituto de Química e Biotecnologia , UFAL, AL, Brasil; [2]Núcleo de Química de Heterociclos, Centro de Ciências Naturais e Exatas, Departamento de Química, UFSM, RS.

SDD-30 **New selective inhibitors of Trypanosoma cruzi triosephosphate isomerase, approach to the mechanism of inhibition.**

Alvarez, G.[1]*; Marins, E.[2]; Tinoco L.[2]; Aguirre-Lopez, B.[3]; Gomez Puyou, A.[3], Tuena de Gomez-Poyou,M.[3], Perez Montfort, R.[3]; Bathyany, C.[4]; Cerecetto, H.[1]; González, M.[1]
[1]Grupo de Química Medicinal, Laboratorio de Química Orgánica, Facultad de Ciencias-Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay. [2]NPPN, UFRJ, RJ, Brazil. [3]Departamento de Bioquímica y Biología Estructural, Instituto de Fisiología Celular, Universidad Nacional Autónoma de México, DF, Mexico. [4]Unidadde Bioquímica y Proteómica Analíticas, Instituto Pasteur de Montevideo, Uruguay.

SDD-31 **Chemometrics studies for a series of azol derivatives active against Cryptococcus neoformans**

Freitas, H. F. *; Castilho, M. S.
Laboratório de Bioinformática e Modelagem Molecular (LaBiMM), Faculdade de Farmácia (UFBA) – Salvador, BA.

SDD-32 **Expression, purification and preliminary functional studies of human galectin-12**

Rustiguel, J.K.[1]*; Dias-Baruffi, M.[2]; Nonato, M. C.[1]
[1]Protein Crystallography Laboratory, FCFRP-USP, SP, Brazil. [2]Glycoimunology Laboratory, FCFRP-USP, SP, Brazil.

SDD-33 **Molecular docking of benzoxazinones and HSV-1 protease as a strategy for drug design**

Mello, J.F.R.[1]*; Brito, M.A.[2]; Souza, A.M.T.[1]; Sodero, A.C.R.[1]; Rodrigues, C.R.[1].
[1]UFRJ, Faculty of Pharmacy, RJ, Brazil; [2]UFF, Niterói-RJ, Brazil.

SDD-34 **Molecular modeling toward selectivity of inhibitors of the enzyme dihydrofolate from Bacillus antrhacis.**

Giacoppo, J. de O. S.[1]*; Mancini, D. T.[1]; Ramalho, T. C.[1]; França, T. C. C.[2]; da Cunha E. F. F.[1]
[1]Laboratory of Computational Chemistry, UFLA, Lavras-MG. [2]Laboratory of Molecular Modeling Applied to the Chemical and Biological Defense (LMDQB), IME, RJ.

SDD-35 **Biochemical and biophysical characterization of dihydroorotate dehydrogenase from Schistosoma mansoni.**

Costacurta, J. S. D.[1]*; Costa Filho, A. J.[2]; Pereira, H. D.[3]; Nonato, M. C.[1]
[1]Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto, USP; [2]Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, USP; [3]Instituto de Física de São Carlos, IFSC.

SDD-36 **Studies on the relationships between the molecular structure of thiosemicarbazones and the inhibition of the cysteine protease cruzain**

Lozano, N. B. H.[1]; Maltarollo, V. G.[2]; Weber, K. C.[3]*; Honorio, K. M.[2,4]; Guido, R. V. C.[5]; Andricopulo, A.D.[5]; Da Silva, A. B. F. [1]*
[1]Instituto de Química de São Carlos - USP; [2]UFABC; [3]Departamento de Química – UFPB; [4]Escola de Artes, Ciências e Humanidades – USP; [5]Instituto de Física de São Carlos - USP.

SDD-37 **3D QSAR studies on a series of Non-Azoles antifungals that are active against Cryptococcus neoformans**

Ribeiro, L. M. B. C.*; Froes, T.Q., Freitas, H. F.; Castilho, M. S.
LaBiMM – Laboratório de Bioinformática e Modelagem Molecular, Faculdade de Farmácia (UFBA), Brasil.

SDD-38 **Computational Studies of the Molecular Mechanisms Responsible for Ca^{2+} Permeation and Mg^{2+} Block of NMDA Receptors**

Veras, L.[1]*; Kurnikov, I.[1]; Johnson, J. W. [2]; Kurnikova, M.[1]
[1]Department of Chemistry, Carnegie Mellon University, PA, USA; [2]Department of Neuroscience, University of Pittsburgh, PA, USA

SDD-39 **Shikimate Kinase of Mycobacterium tuberculosis: kinetics and binding thermodynamics.**

Rosado, L.A. [1,2,3,]* Vasconcelos I.B.[1,3,]; Palma, S.P.[4] ;Santos, D.S.[1,2,3]; Basso L.A.[1,2,3].
[1]Centro de Pesquisas em Biologia Molecular e Funcional (CPBMF), NCT-TB, PUCRS; [2]Programa de Pós-Graduação em Medicina e Ciências da Saúde, PUCRS; [3]Programa de Pós-Graduação Biologia Celular e Molecular, PUCRS. [4]Laboratório de Biologia Estrutural e Zooquímica, Instituto de Biociências de Rio Claro, UNESP, SP, Brazil.

SDD-40 **Generation of 3D Pharmacophore Models based on active ligands and structure of Dihydroorotate Dehydrogenase from Plasmodium falciparum**

Macedo, K. G[1],*.; Braga, R. C.[1,2]; Bueno, R. V.[1]; Andrade, C. H.[1]
[1]Laboratório de Modelagem Molecular (LabMol), Faculdade de Farmácia, UFGO,

Brazil. [2]Laboratório de RMN, Instituto de Química, UFGO, Brazil.

SDD-41 **Fragment-based QSAR Approach on a Series of Inhibitors of Dihydroorotate dehydrogenase: Insights for Design of new Antimalarial Agents**

Magalhães, L.O.*; Gonçalves, E.K.; Neves, B.J; Andrade, C.H.
Laboratório de Modelagem Molecular (LabMol), Faculdade de Farmácia, UFGO – GO, Brazil.

SDD-42 **Application of Ligand and Structure-Based Strategies to a set of Enoyl-ACP Reductase Inhibitors of Plasmodium falciparum**

Neves, B. J.*; Braga, R. C.; Andrade, C. H.
Laboratory of Molecular Modeling (LabMol), Faculty of Pharmacy, UFGO, Goiás, Brazil.

SDD-43 **Design and synthesis of new heterocyclic derivatives with potential activity against Plasmodium falciparum**

Boechat, N.*; Ferreira, M. L. G.; Júnior, C. C. S.; Pinheiro, L. C. S.
Fundação Oswaldo Cruz, Instituto de Tecnologia em Fármacos, Departamento de Síntese Orgânica, Manguinhos, RJ, Brazil.

SDD-44 **Potential tuberculostatic agents: Comparative modeling of a new target and design of maltose analogues based on docking approach**

Segretti, N. D.[1]*; Hoelz, L. V. B.[2]; Alencastro, R. B.[2]; Ferreira, E. I.[1]
[1]USP, Butantã, São Paulo, SP, Brazil. [2]UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brazil.

SDD-45 **Synthesis, biological evaluation and in silico toxicity of peptides mimetic compounds as potential inhibitor of Hepatitis C virus**

Abrahim-Vieira, B.A.[1]; Souza, A.M.T.[1]; Botelho, N.C.; Muri, E.M.F.[2]*; Pinheiro, S.[3]; Cabral, L.M.[4]; Rodrigues, C.R.[1]
[1]Laboratório de Modelagem Molecular & QSAR3D, Faculdade de Farmácia, UFRJ; [2]Laboratório de Química Medicinal, Faculdade de Farmácia, UFF; [3]Departamento de Química Orgânica, UFF; [4]Laboratório de Tecnologia Industrial Farmacêutica, Faculdade de Farmácia, UFRJ.

SDD-46 **Similarity-based virtual screening of novel potential Tau ligands for Alzheimer's disease treatment**

Pedersoli-Mantoani, S.;[1]* Silva, V. B.;[2] Silva, C. H. T. P. [1]
[1]Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto, USP, SP, Brazil. [2]Faculdade de Farmácia, UFGO, GO, Brasil.

SDD-47 **Ligand- and Structure-based Metabolism Studies of a New Drug Candidate Benzaldehyde Semicarbazone (BS)**

Terra, W.J.R*[1]; Braga, R.C.[1,2]; Beraldo, H.[3]; Andrade, C.H.[1]
[1]Faculdade de Farmácia, UFGO – GO, Brazil. [2]Instituto de Química, UFGO – GO, Brazil. [3]Departamento de Química, UFMG – MG, Brazil.

SDD-48 **Docking of Lopinavir and Ritonavir in the Non-Protonated and Mono-Protonated States of Native and Mutant HIV-Proteases**

Barros, T.R.S.; Lima, C.H.S.; Bonato, B.S.; Aguiar, L.C.S.; Kaiser, C.R.; de Alencastro,

R.B.; Albuquerque, M.G.*
UFRJ, Programa de Pós-Graduação Química (PPGQu), Instituto de Química (IQ), Departamento de Química Orgânica (DQO), RJ, Brasil.

SDD-49 **Descriptor and Fragment based 2D QSAR models for a structurally diverse dataset of Microssomal Prostaglandin E Synthase-1 inhibitors**
Froes, T.Q.*, Castilho, M.S.
Laboratório de Bioinformática e Modelagem Molecular – Faculdade de Farmácia

SDD-50 **Inverse Virtual Screening (IVS) of Selected Herbicides**
Silva, T. F.[1]; Marques, G. H.[1]; Comar Júnior, M.[2]; Siqueira, J. M.[2]; Taranto, A.G.*[2]
[1]Centro Federal de Educação Tecnológica – CEFET/MG. [2]Universidade Federal de São João Del Rei, MG, Brazil

SDD-51 **Fragment-based Approach on Diaryl Ethers as Enoyl-ACP Reductase Inhibitors from Mycobacterium tuberculosis**
Toledo, N. R.; Bueno, R. V.; Andrade, C. H.
Laboratório de Modelagem Molecular (LabMol), Faculdade de Farmácia, UFGO, Brazil.

SDD-52 **HQSAR, CoMFA, IN SILICO physico-chemical and toxicological analysys of a series of HIV-1 integrase inhibitors**
Magalhães, U.O.[1]*; Brito, M.A.[2]; Albuquerque, M.G.[3]; Cabral, L.M.[4]; Castro, H.C.[5]; Rodrigues, C.R.[1].
[1]ModMolQSAR, Faculdade de Farmácia, UFRJ. RJ–Brazil; [2]LabQMC, Dep. de Farmácia e Adm. Farmacêutica, UFF. RJ, Brazil; [3]LabMMol, IQ, UFRJ. RJ–Brazil; [4]LabTIF, Faculdade de Farmácia, UFRJ. RJ–Brazil; [5]LaBioMol, Instituto de Biologia, UFF. RJ–Brazil.

SDD-53 **Search for potential chitinase inhibitors of Aspergillus fumigatus by Virtual Screening.**
Pinto, V. S.*; Santos Junior, M. C.; Leite, F. H. A.; Pinheiro, A. A. F.
Laboratório de Modelagem Molecular (LMM), UEFS, Feira de Santana, Bahia.

MEDICINAL CHEMISTRY OF NATURAL PRODUCTS

Code **Title**

MCNP-01 **Inhibitory activity of cathepsins and cytotoxic effects of Hymenaea stigonocarpa (Fabaceae) extracts.**
Monteiro, A.F.[1]*; Severino, R.P.[1]; Vieira, P.C.[2]; Silveira-Lacerda, E.[3]; Severino, V.G. P.[1]
[1]Departamento de Química, UFGO. [2]Departamento de Química, UFSCar. [3]Instituto de Ciências Biológicas, UFGO.

MCNP-02 **Effect of conjugated linoleic acid on asolecitin liposomes dynamics**
Nogueira, A. O. M.; Marques, V. G.; Sousa, R. S.; Clementin, R. M.; Lima, V. R.
FURG, Escola de Química e Alimentos, Rio Grande – RS, Brasil.

MCNP-03 **Evaluation of the toxicity of d-limonene in Wistar rats by inhalation**

Alves, M.F.*[2]; Dias, G.E.[1]; Ramalho, J.A.[1]; Oliveira, K.M.[2]; Guedes, E.J.[1]; Mangueira, L.F.[1]; Gorgonio, I.F.[2]; Ramalho, L.S.[2]; Lira, A.B.[2]; Nóbrega, F.M.[2]; Sá, C.B.[2]; Moreira, M.M.[2]; Fernandes, M.G.[2]; Diniz, M.F.[2]
[1]Post Graduation Program Development and Technological Innovation in Medicament -UFPB/UFRPE/UFC/UFRN. [2]Program Bioactive Natural Products and Synthetic-CCS – UFPB. [3]Department of Pharmaceutical Sciences-UFPB.

MCNP-04 **Design of Phenol Derivatives as Natural Herbicides**

*Carregal, A. P.[1]; Comar Jr, M.[1]; Siqueira, J. M.[1]; Rodrigues, R. P. [2]; Carollo, C. A. [2]; Baroni, A. C. M. [2]; Taranto, A. G.[1].
[1]Universidade Federal de São João Del Rei – MG.[2]UFMS, MS.

MCNP-05 **Antimicrobial activity in vitro of extracts Combretum duarteanum and Combretum laxum on pathogenic bacteria.**

*Cabral, A. G. S.[1]; Nascimento, Y. M.[1]; Lucena, K. L.[2]; Filho, R. N. S.[1]; Nascimento, J. S.[2]; Tavares, J. F.[1]; Barbosa-Filho, J. M[1].
[1]Centro de Ciências da Saúde, UFPB. [2]Laboratório de Microbiologia, Departamento de Fisiologia e Patologia, UFPB.

MCNP-06 **Effect of dehydrozingerone against lipidic peroxidation in brain regions of mice**

Casaril, A.M*[1]; Martinez, D.M.[2]; Victória, F.[2]; Lenardão, E.J.[3]; Barcellos, A.[3]; Savegnago, L.[2]
[1]Centro de Desenvolvimento Tecnológico, Unidade Biotecnologia, UFPel-RS, Brazil. [2]Faculdade de Agronomia Eliseu Maciel, DCTA, UFPel-RS, Brazil. [3]CCQFA, Laboratório de Síntese Orgânica Limpa, UFPel-RS, Brazil.

MCNP-07 **Chemical evaluation of two species of Hippeastrum, Amaryllidaceae, collected in southern Brazil**

Schwedersky, M.B.[1]; Zaparoli, D.B.[1]; Emmerich, D.J.[2]; Zuanazzi, J.A.[3]; Hofmann Jr, A.E.[1]*
[1]Curso de Farmácia - Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões, URI-Erechim. [2]Curso de Química – Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões, URI-Erechim. [3]Faculdade de Farmácia –UFRGS.

MCNP-08 **Synthesis of new (E)-chalcones and aryl analogues as alpha-glucosidase inhibitors**

Abissi, B.M.[1]; Alezandro, M. R.[2]; Genovese, M. I.[2]; Bolzani, V. S.[1]; Regasini, L. O.[1]*
[1]NuBBE, Núcleo de Bioensaios, Biossíntese e Ecofisiologia de Produtos Naturais, IQ, Universidade Estadual Paulista, SP, Brazil; [2]Departamento de Alimentos e Nutrição Experimental, Faculdade de Ciências Farmacêuticas, USP – SP, Brazil.

MCNP-09 **New series of CAPE analogues: a structure activity study searching antitumor activity**

Brito, M. T.*[1]; Emery, F. S.[2]; Castello-Branco, M. V. S.[1]; Almeida, R. N.[1]; Longato, G. B.[3]; Monteiro, P. A.[3]; Ruiz, A. L. T. G.[3]; Carvalho, J. E.[3].
[1]Dpt. of Pharmaceutical Sciences, UFPB, PB. [2]Dpt. of Pharmaceutical Sciences of Faculty of Pharmaceutical Sciences of Ribeirão Preto/USP, SP. [3]Center for Chemical,

Biological and Agricultural Research, CPQBA / UNICAMP, SP.

MCNP-10 Antifungal activity of essential oils of Lamiaceae family on strains of Cladosporium carrionii

*Menezes, C.P.[1]; Sousa, J.P.[1]; Viana, W.P. [1]; Pinheiro, L.S.[1]; Guerra, F.Q.[1]; Lima, E.O.[1]
[1]Laboratory of Mycology, Department of Pharmaceutical Sciences, UFPB, PB, Brazil.

MCNP-11 Cytotoxic Activity of Brazilian Red Propolis on Tumor and Non-tumor Cell Lines

Frozza, C.O.S.[1]*; Salvador, M.[2]; Moura, S.[3]; Padilha, F.F.[4]; Savegnago, L.[5]; Seixas, F. K.[5]; Collares, T.[5]; Borsuk, S.[5]; Dellagostin, O.A[5].; Macedo, M.L.H.[4]; Ganda, I.S.[4]; Droppa-Almeida, D.[4]; Henriques, J.A.P.[1].; Roesch-Ely, M.[1]
[1]Laboratory of Genomics, Proteomics and DNA Repair; [2]Laboratory of Oxidative Stress and Antioxidants; [3]Laboratory of Essential Oils, UCS. Brazil, [4]Laboratory of Biomaterials, Tiradentes University, Brazil.; [5]Center of Technological Development-Biotechnology, UFPel, Brazil.

MCNP-12 Structure-Activity Relationships of Borneol and its derivatives against Ae. aegypti larvae

Martins, U. N.[a]; Santos, R. L. C.[b]; Cavalcanti, S. C. H.[a]*
[a]Medicinal Chemistry Laboratory, Department of Pharmacy; [b]Laboratory of entomology, UFSE, CCBS, SE, Brazil.

MCNP-13 In vitro antifungal effect of the extract of Uncaria tomentosa Linn. on lineages of the genus Candida

Bezerra, C.N.[1]; Soares ,A.R.A.[2] ; Pereira, J. V.[3] ; Pereira, M. S. V.[4]; *Nóbrega, D.R.M.[5]; Souza Júnior,U.P.[6];
[1]Faculdade de Ciências Médicas da Paraíba-PB, Brazil. [2]Faculdade de Ciências Médicas da Paraíba-PB, Brazil. [3]Dental Department of UEPB, PB, Brazil. [4]UFPB, PB, Brazil. [5]Dental Clinic, UEPB, PB, Brazil. [6]UEPB, PB, Brazil.

MCNP-14 Anti-Candida, activity anti-enzyme and cytotoxicity of 2-fenil-4H-cromen-4-ona.

Trecha, D. O.[1]*; Oliveira, S. G. D.[1]; Machado, F. W.[1]; Carvalho, R. V.[2]; Pereira, C. M. P.[3]; Lund, R. G.[1]; Piva, E.[1].
[1]Laboratory of Microbiology, School of Dentistry, UFPel.[2]Department of Operative Dentistry, University of North Parana, PR, Brazil.[3]Laboratory of Bioative Heterocycles and Bioprospection (LAHBBio), Center for Chemical, Pharmaceutical and Food Sciences, UFPel.

MCNP-15 Effects of methanolic extract from marine alga Hypnea musciformis in isolated mesenteric artery of rats.

Lira, D. P.[1]*; Queiroz, T. M.[1]; Medeiros, M. L.[1]; Braga, V. A.[2]; Santos, B. V. O.[1]; Barbosa-Filho, J. M[1].
[1]Centro de Ciências da Saúde, UFPB. [2]Centro de Biotecnologia, UFPB.

MCNP-16 Evaluation of the antidepressant-like effect of the essential oil of Eugenia uniflora leaves in mice

De S.B., Arthur.[1]*; Victoria, F.N.[2]; Martinez, D.M.[2]; Lenardão, E.J.[3]; Savegnago,L[2].
[1]Centro de Desenvolvimento Tecnológico, Unidade Biotecnologia, UFPel-RS, Brazil. [2]Faculdade de Agronomia Eliseu Maciel, DCTA, UFPel-RS, Brazil. [3]CCQFA, Laboratório de Síntese Orgânica Limpa, UFPel-RS, Brazil.

MCNP-17 **Antidepressant-like effect of dehydrozingerone in mice**

Martinez, D. M.[1]*; Casaril, A. M.[2]; Barcellos, A.[3]; Victoria, F.[1]; Lenardão, E. J.[3]; Savegnago, L.[2]
[1]Faculdade de Agronomia Eliseu Maciel, DCTA, UFPel-RS, Brazil. [2]Centro de Desenvolvimento Tecnológico, Unidade Biotecnologia, UFPel-RS, Brazil. [3]CCQFA, Laboratório de Síntese Orgânica Limpa, UFPel-RS, Brazil.

MCNP-18 **Evaluation of acute toxicity of ethanolic extract of Pilosocereus gounellei K. Schum in rats**

*Dias, G.E.;[1] Ramalho, J.A.;[1] Oliveira, K.M.;[2] Guedes, E.J. R.;[1] Mangueira, L.F.;[1] Alves, M.F.;[2]Gorgonio, I.F.;[2] Ramalho, L.S.;[2] Lira, A.B.;[2] Nóbrega, F.M.;[2] Sá, C.B.;[2] Moreira, M.M.;[2] Fernandes, M.G.;[2] Souza, M.F.;[3] Diniz, M.F.[3]
[1]Post-Graduation Program Development and Technological Innovation in Medicament-UFPB/UFRPE/UFC/UFRN. [2]Program Bioactive Natural Products and Synthetic-CCS – UFPB.[3]Department of Pharmaceutical Sciences-UFPB

MCNP-19 **Antinociceptive activity of ethanolic and aqueous fractions of the stem of Costus cf. arabicus**

Silva, D.F.[1]*; Araújo, M.V.[1]; Cavalcante-Silva, L.H.[1]; Falcão, M.A.[1]; Teixeira, C.S.[2]; Viana, M.D.[1]; Alexandre-Moreira, M.S.[1]; Campesatto, E.A.[1]; Sant'Ana, A.E.[3]; Rocha, B.A.[2]
[1]Laboratório de Farmacologia e Imunidade - LaFI, Instituto de Ciências Biológicas e da Saúde, UFAL, AL, Brasil. [2]Laboratório de Moléculas Biologicamente Ativas - BioMol-Lab, Departamento de Bioquímica e Biologia Molecular, UFCE, Brasil. [3]Laboratório de Pesquisa em Química dos Produtos Naturais – LPQPN, Instituto de Química e Biotecnologia, UFAL, Alagoas, Brasil.

MCNP-20 **Chemical profile and biological evaluation of volatile compounds of Solidago chilensis Meyen**

Valverde, S.S.[a,b]; Souza, S.P[a,b]*; Eboli, R.C.[b]; Costa, F.N.[c]; Petronilho E.C.[a]; Calheiros, A.S.[c]; Lima,K.S.[a]; Frutuoso, V.S[b].; Lima, A.L.[a].
[a]Chemical Engineering Department, IME/RJ, Brazil. [b]Institute of Technology in Pharmaceuticals, FarManguinhos – FIOCRUZ, RJ, Brazil. [c]Immunopharmacology Laboratory, IOC – FIOCRUZ, RJ, Brazil.

MCNP-21 **Hypoglycemic, Hypolipidemic and Antiperoxidative potentials of saponins from Solanum anguivi Lam. fruits on diabetic rats**

Elekofehinti, O.O.[1,2,4]*; Adanlawo, I.G.[2]; Kade, I.J.[3]; Rochas J.B.T.[4]
[1]Department of Biochemistry, Adekunle Ajasin University, Nigeria, [2]Department of Biochemistry, University of Ado Ekiti, Nigeria, [3]Department of Biochemistry, Federal University of Technology. Nigeria, [4]Postgraduate Programme in Biochemical Toxicology, Department of Chemistry, CCNE, UFSM, RS, Brazil.

MCNP-22 **Quinovic acid glycosides fraction of Uncaria tomentosa down regulate COX-2**

and induces apoptosis in T24 human bladder cancer cell line

Dietrich, F.[1]*; Kaiser, S.[2]; Figueiró, F.[1]; Rockenback, L.[1]; Cunha, F.M.[1]; Morrone, F.B.[3]; Ortega, G.G.[2]; Battastini, A.M.O.[1]

[1]Departamento de Bioquímica, ICBS, UFRGS, Brasil. [2]Departamento de Produção e Controle de Medicamentos, Faculdade de Farmácia, UFRGS, RS, Brasil. [3]Farmacologia Aplicada, Faculdade de Farmácia, PUCRS, RS, Brasil.

MCNP-23 **Selection of a new hit for anti-Trypanosoma cruzi activity among the benzopyrans isolated from Hypericum polyanthemum**

Corvello, F.[1]*; Nascimento, F.G.[1]; Birriel, E.[2]; Varela, J.[2]; González, M.[2]; Cerecetto, H.[2]; von Poser, G.L.[1]; Eifler-Lima, V.L.[1].

[1]Grupo de Pesquisa em Síntese Orgânica Medicinal, Faculdade de Farmácia, UFRGS, Brasil. [2]Grupo de Química Medicinal, Facultad de Ciencias-Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay.

MCNP-24 **Hepatoprotective effect of the essential oil of Eugenia uniflora leaves against acetaminophen-induced hepatotoxicity in mice**

Victoria, F. N.[1]*; Martinez, D. M.[1]; Savegnago, L.[2]; Lenardão, E. J.[3]

[1]Faculdade de Agronomia Eliseu Maciel, DCTA, UFPel-RS, Brazil. [2]Centro de Desenvolvimento Tecnológico, Unidade Biotecnologia, UFPel, RS, Brazil. [3]CCQFA, Laboratório de Síntese Orgânica Limpa, UFPel-RS, Brazil.

MCNP-25 **Extraction, purification and characterization of α-glucan produced by Moniliophthora perniciosa CCMB 0257**

Valasques Junior, G. L.*; Assis, S. A.

Programa de Pós Graduação em Biotecnologia PPG Biotec UEFS/Fiocruz. Laboratório de Enzimologia e Tecnologia das Fermentações LAEN

MCNP-26 **Chemopreventive effect of copalic acid on 1,2-dimethylhydrazine induced preneoplastic lesions in rat colon**

Alves JM[1], Senedese JM[1], Leandro LF[1], Pereira DE[1], Ambrósio SR[1], Bastos JK[2]and Tavares DC[1].

[1]Universidade de Franca, SP, Brazil; [2]FCFRP – USP, Ribeirão Preto, São Paulo.

MCNP-27 **Preliminary Antimicrobial Evaluation of some Thiophene Derivatives**

Oliveira, J. G. B.[1]*; Lima, E. O.[2]; Diniz, I. O.[1]; Mendonça Junior, F. J. B.[1]*;

[1]Laboratório de Síntese e Vetorização de Moléculas, UEPB, PB, Brasil; [2]Laboratório de Micologia, UFPB, Brasil.

MCNP-28 **Inhibition of proteolytic enzymes by derivatives of natural polyprenylated benzophenone isolated from Rheedia brasiliensis**

Januário, J.P.[1,2]*; Dias, K.S.T.[1,2]; Assis, D.M.[3]; Juliano, M.A.[3]; Viegas Jr., C.[1]; Santos, M.H.[1]

[1]Laboratório de Fitoquímica e Química Medicinal, Universidade Federal de Alfenas, MG, Brazil. [2]Programa de Pós-Graduação em Química, Universidade Federal de Alfenas, MG, Brazil. [3]Departamento de Biofísica, UFSP, SP, Brazil.

MCNP-29 **Antifungal activity and exoenzyme production of some fatty acids and their**

esters.

Souza, J. L. S.[1]*; Lund, R. G[1].; Pereira C. M. P[2].
[1]Laboratório de Microbiologia Oral, Faculdade de Odontologia, UFPel, RS, Brazil. [2]Departamento de Química Orgânica, UFPel, RS, Brazil.

MCNP-30 **In vitro evaluation of triterpenes acids on promastigotes forms of Leishmania chagasi and Leishmania braziliensis**

*Furini, J; Gonçalez, C; Albuquerque, S
Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto, USP, SP, Brasil

MCNP-31 **New curcumin-coumarin hybrid: synthesis, antioxidant activity and set up of a LC method for its assay in lipid-core nanocapsules**

Coradini, K.[1]*; Corvello, F.[1]; Bubols, G.[1]; Rocha, A.[2]; Monserrat, J.M.[2]; Garcia, S.C.[1]; von Poser, G.L[1]; Eifler-Lima, V.L.[1]; Beck, R.C.R[1].
[1]Faculdade de Farmácia, UFRGS, Brasil. [2]Instituto de Ciências Biológicas, Universidade Federal do Rio Grande. Brasil.

MCNP-32 **Isolation, structural identification and pharmacological activity of Caulerpa sertularioides (Caulerpaceae)**

Bastos, K. X.[1]*; Sousa, J. C. F.[1]; Santos, B. V. O.[1]
[1]UFPB, Programa de Pós-graduação em Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos, PB, Brasil.

MCNP-33 **Involvement of α2 noradrenergic receptors in the gastroprotective effectof ethanol extract from leaves Duguetia furfuracea (A. St.-Hil.).**

Kerntopf, M.R.[1,2,3]; Fernandes, C.N.[2,3]*; Souza, H.H.[2,3]; Costa, J.G.[1,2,3]; Menezes, I. A.[1,2,3]; Siebra, A.L.[2,3]; Coutinho, H.D.[1,2,3]; Oliveira, L.R.[2,3]; Sampaio, R.S.[2,3]; Silva, R.A.[4]
[1]Department of Biological Chemistry; [2]Graduate Program in Molecular Bioprospecting; [3]Regional University of Cariri, CE, Brazil; [4]Biological in Graduate – Regional University of Cariri, CE, Brazil.

MCNP-34 **Comparative evaluation of antimicrobial activity of tannins isolated from Mimosa tenuiflora (WILD) and Piptadenia stipulacea (BENTH) on clinical isolates of multidrug-resistant Staphylococcus aureus of human origin hospital.**

Medeiros, K.L.[1]*; Peixoto, M.S.[2]; Cavalcanti, V.M.[2]; Silva, V.A.[2]; Freitas, A.F.[2]; Pereira, M.S.[2]; Pereira, A.V.[3]
[1]UFPB; [2]UFPB; [3]Faculdade de Medicina de Botucatu, UNESP.

MCNP-35 **In vitro Antioxidant Activity and HPLC Analysis of Parkia biglobosa Leaf Extract**

Komolafe, K.[1,2]*; Olaleye, M.T.[1]; Boligon, A.A[2]; Athayde, M.L.[2]; Rocha, J.B.T[2].
[1]Department of Biochemistry, School of sciences, Federal University of Technology, Nigeria. [2]Departmento de Química, Bioquímica Toxicologia, (CCNE), UFSM, RS, Brazil.

MCNP-36 **Semisynthesis and antimicrobial activity of novel guttiferone-A derivatives**

Dias, K.S.[1]*; Januário, J.P.[1]; D'Dego, J.L.[1]; Dias, A.L.[2]; dos Santos, M.H.[1]; Camps, I.[3], Coelho, L.F.[2]; Viegas Jr., C.[1]

[1]LFQM - Laboratório de Fitoquímica e Química Medicinal, IQ, UNIFAL-MG, MG, Brazil. [2]Laboratório de Microbiologia e Imunologia, Instituto de Ciências Biomédicas, UNIFAL-MG, MG, Brazil. [3]Laboratório de Modelagem Molecular, Instituto de Ciências Exatas, UNIFAL-MG, MG, Brazil.

MCNP-37 **Analysis of Origanum vulgare essential oil for inhibition of Fusarium strains**

*Pinheiro, L.S.[1]; Viana, W.P.[1]; Menezes, C.P.[1]; Lima, E.O.[1], Trajano, V.N.[2]; Souza, V.G.[2]; Souza, F.S.[2].

[1]Laboratory of Mycology, Department of Pharmaceutical Sciences, UFPB - PB, Brazil. [2]Unified Laboratory of Pharmaceutical Development and Assay, Department of Pharmaceutical Sciences, UFPB - PB, Brazil.

MCNP-38 **Spasmolytic effect of caulerpin involves blockade of Ca^{2+} influx on guinea-pig ileum**

[1]Cavalcante-Silva, L.H.*; [2]Correia, A.C.; [2]Souza, J.C.; [3]Miranda, G.E.; [2,4]Santos, B.V.; [2,4]Barbosa-Filho, J.M.; [2,4]Silva, B.A.; [5]Cavalcante, F.A.; [1]Alexandre-Moreira, M.S.

[1]Setor de Fisiologia e Farmacologia, UFAL, AL, Brasil. [2]Pós-Graduação Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos, UFPB, PB, Brasil. [3]Departamento de Sistemática e Ecologia, UFPB, PB, Brasil. [4]Departamento de Ciências Farmacêuticas, UFPB, PB, Brasil. [5]Departamento de Fisiologia e Patologia, UFPB, PB, Brasil.

MCNP-39 **In vitro evaluation of antibacterial, cytotoxic and enzymatic activities of the ethanolic extract of Byrsonima coccolobifolia Kunth.**

Faleiros-Santos, M.H.[1]*; Sadoyama, G.[2]; Vieira, P.C.[3]; Silveira-Lacerda, E.[4]; Severino, R. P.[1]

[1]Departamento de Química, UFGO. [2]Departamento de Ciências Biológicas, UFGO. [3]Departamento de Química, UFSCar. [4]Instituto de Ciências Biológicas, UFGO.

MCNP-40 **Antinociceptive activity of 7-methoxyflavone isolated from Zornia brasiliensis**

Falcão, M.A.[1]*;Cavalcante-Silva, L.H.[1]; Silva, A.D.[2]; Silva, D.F.[1]; Silva, A.E.[1]; Tenório, A.P.[1]; Souza, S.S.[3]; Tavares, J.F.[3]; Silva, M.S.[3]; Alexandre-Moreira, M.S[1].

[1]Laboratório de Farmacologia e Imunidade, ICBS, UFAL, AL, Brazil. [2]Programa de Pós-graduação Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos, UFPB, PB, Brazil. [3]Departamento de Ciências Farmacêuticas, UFPB, PB, Brazil.

SESSION 2 – TUESDAY, OCTOBER 30

SYNTHESIS AND PHARMACOLOGICAL ACTIVITY

Code **Title**

OSPS-75 **Synthesis of new NSAIDs derivates designed as antiplatelet, analgesic and anti-inflammatory compounds**

*Dutra, L. A.[1]; Chelucci, R. C.[1]; Chiquetto, R.[1]; Pires, M. E. L.[2]; Marcondes, Sisi.[2]; Chung, M. C.[1]; Santos, J. L.[1]

Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Araraquara, Unesp[1]; Faculdade de Ciências Médicas de Campinas, Unicamp[2]; Universidade Federal de São Carlos, UFSCar[3].

OSPS-76 **LASSBio-579, an antipsychotic prototype drug, is effective in animal models of cognitive impairments.**

*Antonio, C.B.[1,2]; Neves, G.[1,2]; Betti, A.H[1,2]; Herzfeldt, V.[1,2]; Barreiro, E.J.[3]; Fraga, C.A.M.[3]; Rates, S.M.K.[1,2]

[1]Laboratório de Psicofarmacologia Experimental, UFRGS; [2]PPG-CF, UFRGS; [3]Faculdade de Farmácia – LASSBio, UFRJ.

OSPS-77 **Synthesis and anti-mosquito properties of methyl 2,6-diphenyl-1-p-tolyl-4-(p-tolylamino)-1,2,5,6-tetrahydropyridine-3-carboxylate**

Venugopala, K. N.; Chalannavar, R. K*.; Odhav B.

Department of Biotechnology and Food Technology, Durban University of Technology, South Africa

OSPS-78 **Trypanosomicidal activity of isoxazolyl-4-phenylsemicarbazones and isoxazolyl-4-phenylthiosemicarbazones on trypomastigote stage**

Mendes, C. C. D. B.[1]; Almeida, G. C.[1]; Pereira, V. R. A.[2]; Faria, A. R.[1*] .

[1]Laboratório de Síntese Orgânica Aplicada a Fármacos – LASOF, UFPE, PE. [2]Laboratório de Imunogenética, Fiocruz, UFPE - PE.

OSPS-79 **Studies of Conformational analysis and synthesis of intermediates in order to obtain the NAPROXEN**

Paiva, D. R.*, Reginato, M. M., Oliveira-Silva D., Reis A. K. C.*

Universidade Federal de São Paulo – UNIFESP

OSPS-80 **4D-QSAR models for inhibitors of dopamine D2 receptors**

Silva, D. R.[1*]; da Cunha, E. F. F.[1]

[1]Laboratory of Computational Chemistry - Federal University of Lavras - Department of Chemistry, MG.

OSPS-81 **Bacillamide C and analogues, synthesis and bioactivity**

Martínez, V.[1*]; Saldaña, J.[2]; Davyt, D.[1]

[1-]Cát. Química Farmacéutica, [2] Lab. Experimentación Animal, Ftad. de Química, UdelaR, Uruguay.

OSPS-82 **Synthesis and evaluation of 2,3-diarylquinoxalines as estrogen receptor ligands**

Sangi, D. P.[a*]; Cominetti, M. R. [b]; Varanda, E. A. [c]; Corrêa, A. G.[a]

[a]Departamento de Química,[b]Departamento de Enfermagem, UFSCar-SP. [c]Faculdade de Ciências Farmacêuticas, UNESP, Araraquara-SP, Brazil

OSPS-83 **Synthesis and in vitro evaluation of N-acylhydrazone as antibacterial and antifungal agents**

Carvalho, B.D.[1]; Cachiba, T.H.[1]; Cusinato, M.[2]; Prado, C.G.[2]; Dias, A.L.[2]; Carvalho, D. T.[1*]

[1]Faculdade de Ciências Farmacêuticas, UNIFAL-MG; [2]Instituto de Ciências Biomédicas, UNIFAL-MG, MG, Brasil.

OSPS-84 **Synthesis, in vitro antifungal activity and in silico studies (QSAR) of bis-, tris- & tetra-thioureido substituted sulfur/amino/ether derivatives**

Oliveira, S. R.[1]; Silva, L. L. [1]; Nogueira, L. J. [1]; Donnici, C.L.[1*]; Stoianoff, M. A. R.[2]; Montanari, C. A.[3]
[1]Depto. de Química/ICEx, [2]Depto. de Microbiologia/ICB, UFMG, MG, Brazil; [3]Instituto de Química de São Carlos, USP, SP, Brazil

OSPS-85 **Study of 2-acetyl-1,3,4-oxadiazoles analogues against Trypanosoma cruzi: design, synthesis, biological activity, cytotoxicity and molecular properties evaluation**

Palace-Berl, F.[*1]; Jorge, S. D.[1]; Pasqualoto, K. F. M.[2]; Zorzi, R. R.[1]; Bortolozzo, L. S.[1]; Lindoso, J. A. L.[3]; Tavares, L. C.[1]
[1]Department of Biochemical and Pharmaceutical Technology, FCF/USP; [2]Laboratory of Biochemistry and Biophysics, Butantã Institute, SP, Brazil; [3]Laboratory of Seroepidemiology, Institute of Tropical Medicine & Institute of Infectology Emílio Ribas, SP, Brazil.

OSPS-86 **Synthesis and Molecular Docking of Dialkylphosphorylhydrazones as Proposed Inhibitors of T. cruzi Ribose-5-phosphate-isomerase**

Faria, M. V. H.; Gonçalves, V. T.; Costa, J. B. N, Sant'Anna, C. M. R.[*]
Departamento de Química, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, RJ.

OSPS-87 **Synthesis, molecular modeling and preliminary evaluation of antibacterial activity of 4'carboxy-chalcones bioisosteres**

Baptista, B. M.; Silva, A. S.; Trindade, P.; Faoro, D.; Paula, F. R.[1*]
Curso de Farmácia, Universidade Federal do Pampa, Uruguaiana, RS, Brasil.

OSPS-88 **Synthesis of dihydropyrimidin-2-thione derivatives and evaluation of their activities against Trypanosoma cruzi.**

Janarelli, F. E.[1*]; Corbelini, P. F.[1]; Nascimento, F.[1]; Russowsky, D.[2]; Varela, J.[3]; Birriel, E.[3]; González, M.[3]; Cerecetto, H.[3]; Eifler-Lima, V. L.[1.]
[1]LaSOM/Laboratório de Síntese Orgânica Medicinal, UFRGS, RS; [2]Instituto de Química, UFRGS; [3]Grupo de Química Medicinal, Facultad de Ciencias-Facultad de Química, UdelaR.

OSPS-89 **Diastereoselective synthesis and cytotoxic profile of new cyclopenta[b]indole derivatives prepared from Morita-Baylis-Hillman adducts**

Santos, M.S.[1]; Rodrigues Jr[1], M.T.; Costa, D.B.V.[2]; Carvalho, J.E.[2;] Coelho, F.[1*]
[1]DQO–Chemistry Institute, UNICAMP, SP, Brazil; [2]CPQBA-UNICAMP, SP, Brazil

OSPS-90 **Antibacterial profile of spirocyclohexadienones prepared from Morita-Baylis-Hillman adducts**

Martins, L. J.[1]; Ferreira, B. R. V.[1]; Lancellotti, M.[2]; Coelho, F.[1]*.
[1]UNICAMP - Chemistry Institute, SP, Brazil; [2]UNICAMP - Institute of Biology, SP – Brazil

OSPS-91 **Cytotoxicity of a thiosemicarbazone and its gold and platinum complexes against glioma cells. Studies on the mode of action**

Ferraz, K. S. O.[1*]; Costa, F. M.[2]; Mendes, B. M.[2]; Rodrigues, B. L.[1]; Santos, R. G.[2]; Beraldo, H[1].
[1]Departamento de Química, UFMG, Brazil. [2]Centro de Desenvolvimento da Tecnologia

Nuclear, CDTN, MG, Brazil.

OSPS-92 **The antitumor activity of the LaSOM 63 against glioma cells is mediated by inhibition of the ecto-5'-nucleotidase / CD73 enzyme**

Figueiró, F.[1]*; Mendes F. B.[1]; Janarelli, F.[2]; Jandrey, E. H. F.[1]; Huber, P.[2]; Russowsky, D.[3]; Eifler-Lima, V.L.[2]; Battastini, A. M. O.[1]
[1]Departamento de Bioquímica, ICBS, UFRGS, Brasil. [2]LaSOM/Laboratório de Síntese Orgânica Medicina, UFRGS. [3]Instituto de Química, UFRGS, Brasil.

OSPS-93 **Involvement of GABAergic sytem in the antinociceptive effect induced by nerolidol**

Fonsêca, D.V.[1,*]; Carvalho, F.L.[1]; Salgado, P.R.R.[1]; Salvadori, M.G.S.S.[1]; Penha, A.R.S.[1]; Braga, R.M.[1]; Paulo, L.L.[1]; Figueiredo, D.A.F.[1]; De Sousa, D.P.[2]; Morais, L.C.S.L.[1]; Almeida, R.N.[1]
[1]UFPB, Laboratory of Pharmaceutical Technology, PB, Brazil. [2]Department of Physiology, UFSE, SE, Brazil.

OSPS-94 **Synthesis and biological activity evaluation of piperine derivatives.**

Duarte, B. O.; Xavier, M. C.; Rito, B. V. A.; Ponte, C.G.; Pereira, E. M.; Cotrim, B. A., Resende, G. O.*
Grupo de Química Medicinal - Núcleo de Ciências Químicas (NCQ). IFR. RJ.

OSPS-95 **Synthesis of galactosyl-triazol-benzenesulfonamides as potential inhibitors of trans-sialidade Trypanosoma cruzi**

Junqueira*, G. G.; De Andrade, P.; Carvalho, I.
Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto, USP, SP, Brasil

OSPS-96 **Synthesis and albumin binding properties of Zn(II) complexes with fluoroquinolones antibiotics**

Gouvea, L.R.[1*]; Denadai, A.M.L.[2]; Teixeira, L.R.[1]
[1]Departamento de Química, UFMG, MG, Brazil. [2]Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, MG, Brazil.

OSPS-97 **Explaining by Quantum Mechanics the Affinity of Partial Agonists Willardiine and AMPA receptors**

Lima Neto, J. X.[1*], Ourique, G. S.[1], Oliveira, J. I. N.[1], Fulco, U. L.[1], Freire, V. N.[2], Albuquerque, E.L.[1]
[1]Department of Biophysics & Pharmacology (DBF), UFRN. [2]Department of Physics, UFCE.

OSPS-98 **Synthesis and evaluation of 1,4- and 1,5-disubstituted triazoles as acetylcholinesterase inhibitors**

Monteiro, J. L.*; Vanzolini, K. L.; Cass, Q. B.; Paixão, M.W.; Corrêa, A. G.
Departamento de Química, UFSCar, SP, Brasil.

OSPS-99 **Synthesis of natural triazole products derivatives with potential antimalarial activity**

J. O. Santos, G. R. Pereira, G. C. Brandão, A. B. Oliveira

[1]Faculdade de Farmácia/UFMG - Belo Horizonte/MG

OSPS-100 **Semi-synthetic derivatives of elatol and isoobtusol**

Lang, K.L.[1*], Zimmermann, L.A[1], Lhullier, C.[1], Arana, M.V.M.[2], Palermo, J.A.[2], Falkenberg, M.[1], Schenkel,E.P.[1], Durán, F.J[2]
[1]Programa de Pós-graduação em Farmácia, UFS, Brazil. [2]Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA, Argentina.

OSPS-101 **Adenosine deaminase activity and cytotoxicity in rat cortex slices exposed to selenium compounds.**

Cargnelutti, L. O.[1]*; Bitencourt, P. E. R.[1]; Bellé, L. P.[2]; De Bona, K. S.[2]; Moretto, M. B.[2,3]
[1]School of Pharmacy, UFSM, RS, Brazil. [2]Postgraduate Program on Pharmacology. [3]Postgraduate Program on Pharmaceutical Sciences, UFSM, RS, Brazil.

OSPS-102 **Bis and tris-thiazoles synthesis and anthelmintic activitiy evaluation**

Guidali, F.; Parpal, F.; Imbriago, Y.; Landeira, L.; Manta, E.; Serra, G.; Scarone, L.*
Facultad de Química, UDELAR, Montevideo, Uruguay.

OSPS-103 **Synthesis and Pharmacological Activity of New Acetyl Salicilic Acid Hybrid Analogues Useful for Treatment and Prevention of Atherothrombosis**

*Rosseto, L. A.[1]; Melo, T. R. F.[1]; Chelucci, R. C.[1]; Lopes Pires, M. E.[2]; Marcondes, S.[2]; Cerecetto, H.[3]; González, M. [3]; Chung, M. C.[1]; Santos, J. L.[1]
[1]Faculdade de Ciências Farmacêuticas, UNESP – Brazil. [2]Faculdade de Ciências Médicas, UNICAMP – Brazil. [3]Facultad de Química, Universidad de La República – Uruguay.

OSPS-104 **Design, Synthesis and Antimicrobial Activity of 5-Nitro-2-Thiophylidene Derivatives Against Multidrug-Resistant Staphylococcus aureus.**

Bortolozzo, L. S*; Zorzi, R. R.; Jorge, S. D.; Palace-Berl, F.; Tavares, L.C.
Department of Biochemical and Pharmaceutical Technology, Faculty of Pharmaceutical Sciences, USP, SP, Brazil.

OSPS-105 **Synthesis and antileishmanial activity of 1H-pyrazolo[3,4-b]pyridine phosphoramidate analogs**

Pedrosa, L. F.[1]; Furtado, A. C. R.[1]; Souza, M. C.[1]; Machado, G. M. C.[2]; Becker, K. M.[2]; Cavalheiro, M. M. C.[2]; Bernardino, A. M. R.[1]*
[1]UFF, IQ, RJ. [2]Laboratório de Bioquímica de Tripanossomatídeos, FIOCRUZ, RJ.

OSPS-106 **Synthesis of new derivatives of Nitrofurantoin and evaluation of their antimicrobial activity**

Junior, L. S. S. [1]*; Souza, M. I. F.[1]; Silva J. D.[1]; Santos A. V.[1]; Vieira. L. E. B.[1]; Martins, C. G. B.[1]; Dionízio. B. P.[1]; Maimoni. J. V.[1]; Araújo, J. M.[2]; Brondani D. J.[1].
[1]Laboratório de Planejamento Avaliação e Síntese de Fármacos, LABSINFA; [2]Departamento de Antibióticos – UFPE.

OSPS-107 **Synthesis and Pharmacological Evaluation of Acetylcholinesterase Inhibitors Designed from Cardanol**

Lemes, L. F. N.[1,2]*; Silva, F. M. R.[3]; Peçanha, D. D. F.[3]; Castro, N. G.[3]; Romeiro, L. A. S.[1,2]

[1]Laboratório de Desenvolvimento de Estratégias Terapêuticas, Universidade Católica de Brasília-DF; [2]Faculdade de Ciências da Saúde, UNB-DF; [3]Laboratório de Farmacologia Molecular, UFRJ-RJ.

OSPS-108 **Cytotoxicity of novel compounds Triazenes complexed with Pd(II).**

Sousa, L. U.*[1]; Horner, R.[1]; Kempfer, C. B.[1]; Tizotti, M. K.[1]; Zambiazi, P.J.[2]; Silveira, T.F.[1]; Horner, M.[2]
[1]UFSM, Departamento de Análises Clínicas e Toxicológicas, RS, Brasil. [2]UFSM, Departamento de Química, RS, Brasil.

OSPS-109 **Discovery of low nanomolar thiosemicarbazone cruzain inhibitors**

Cruz, L.F.[1]; Moreira, D.R.M.[2]; Leite, A.C.L.[2] ; Ferreira, R.S.[1]*
[1]Departamento de Bioquímica e Imunologia, Instituto de Ciências Biológica, UFMG, MG, Brasil. [2]Departamento de Ciências Farmacêuticas, CCS, UFPE, PE, Brazil.

OSPS-110 **Thermodynamics framework of hydrophobic/electrostatic interactions can drive the protein folding**

Santos, L. A.*; Ramalho, T. C.; da Cunha, E.F.F.
Laboratory of Computational Chemistry - Federal University of Lavras – MG

OSPS-111 **Synthesis and cytotoxic evaluation of ciclopenta- and ciclohepta-[b]thiophene derivatives in bioassays on Artemia salina Leach**

Luna, I. S.[1]; De Oliveira, J. G. B.[1]; Cruz, R. M. D.[1,2]; De Moura, R. O.[1]; Mendonça Junior, F. J. B.[1]*
[1]Laboratório de Síntese e Vetorização de Moléculas, UEPB, Brazil. [2]Centro de Biotecnologia, UFPB, Brazil.

OSPS-112 **Design, Synthesis and Pharmacological Evaluation of New Anti-Inflammatory Hybrid Compounds**

Machado, M. G. M .[1]*; Rosseto, L. A.[1]; Chelucci, R. C.[1]; Santos, J. L.[1]; Chung, M. C.[1]
[1]Lapdesf – Laboratory of Drug Design, School of Pharmaceutical Sciences, UNESP, SP, Brazil.

OSPS-113 **Evaluation of antileukemic and antibacterial activities of 1,2,3-benzotriazin-4(3H)-one and related triazenide complexes with Cu(II)**

Tizotti, M. K.[1]*; Hörner, R.[1]; Kempfer, C. B.[1]; Sousa, L. U.[1]; Garzon L.[1]; Paraginski, G. L.[2]; Hörner, M.[2]
[1]UFSM, Departamento de Análises Clínicas e Toxicológicas, RS, Brazil. [2]UFSM, Departamento de Química, RS, Brazil.

OSPS-114 **Cytotoxic evaluation of compound derived from imidazolidine-2,4-dione in MDAMB-435, HCT-8 and HL-60 cells**

*[1]Carvalho, M. S; [2]Lima, M. C. A.; [2]Galdino, S. L.; [2]Pitta, I. R.; [3]Pessoa, C. do Ó; [3]Moraes; M. O.
[1]Laboratório de Farmacologia, UFRN; [2]Laboratório de Planejamento e Síntese de Fármacos (LPSF); Grupo de Pesquisa em Inovação Terapêutica (GPIT)-Departamento de Antibióticos/UFPE; INCT;[3]Laboratório de Oncologia Experimental. UFCE.

OSPS-115 **Synthesis of new derivatives of Nitrofurantoin and evaluation of antitumor activity.**

Souza, M. I. F*.[1]; Junior, L. S. S.[1]; Silva J. D.[1]; Santos A. V.[1]; Vieira. L. E. B.[1]; Martins, C. G. B.[1]; Dionízio. B. P.[2]; Brondani D. J.[1]; Silva, T. G.[1].

[1]Laboratório de Planejamento Avaliação e Síntese de Fármacos–LABSINFA; [2]Departamento de Antibióticos - UFPE.

OSPS-116 **Design and synthesis of capsaicin analogues with potential antitumor activity**

Damião, M. C. F. C. B.[1]; Ferreira, A. K[2]; Parise-Filho, R.[1]

[1]Department of Pharmacy, USP, SP, Brazil. [2]Laboratory of Biochemical and Biophysics, Butantan Institute, SP, Brazil

OSPS-117 **Biological Activity Screening of Eugenol Derivatives**

Farias, M.D.[1]; Dutra, F.S.P.[2]; Schneider, N.F.Z.[3]; Guimarães, T.[3]; Reginatto, F.H.[3]; Simões, C.M.O.[3]; Ritter, M.[1]; Pereira, C.M.P.[1]; Barschak, A.G.[2]; Lencina, C.L.[1]*

[1]Laboratório de Heterociclos Bioativos e Bioprospecção - LAHBBio, CCQFA, UFPel, RS, Brazil. [2]Laboratório de Biomarcadores, CCQFA, UFPel, RS, Brazil. [3]CCS – UFSC.

OSPS-118 **Environmentally friendly salicylic acid promoted Biginelli synthesis under ultrasonic irradiation**

Ritter, M.[1]; Possignollo, J.[1]; Tuchtenhagen, C. P.[1]; Farias, M. D.[1]; Muchale, B. V.[1]; Lencina, C. L.[1]; Pereira, C. M. P.[1]*

[1]Laboratório de Heterociclos Bioativos e Bioprospecção, LAHBBio, CCQFA, UFPel, RS, Brazil.

OSPS-119 **3-(Difluoromethyl) and tetrazole analogues of cinnamic acid with antibacterial activity. A bioisosteric approach**

Martinez, M. D.[1]*; Mora, V.[2]; Bertoncello, L.[2]; Zini, E.[2]; Guimarães, T.[3]; Reginatto, F. H.[3]; Burton, G.[1]; Duran, F.J.[1]

[1]Departamento de Química Orgánica and UMYMFOR, Argentina; [2]Laboratorios Richmond S.A.C.I.F., Argentina; [3]Departamento de Ciências Farmacêuticas, UFSC, Brazil.

OSPS-120 **Cytotoxic effect of LaSOM 65 is neither mediated by mitosis dysfunction nor by ecto-5'-nucleotidase inhibition**

Mendes, F. B.[1]; Stuepp, C. S.[1]; Figueiró, F.[1]; Braganhol, E.[1]; Bernardi, A.[1]; Canto, R. F. S.[2]; Russowsky, D.[3]; Eifler-Lima V. L.[2]; Battastini A. M. O.[1]*

[1]Departamento de Bioquímica, ICBS, UFRGS; [2]Laboratório de Síntese Orgânica Medicinal/LaSOM, UFRGS; [3]Instituto de Química, UFRGS, RS, Brasil.

OSPS-121 **Molecular modeling and evaluation of the antinociceptive activity of 4-(3H)-pyrimidinones derivatives**

Monteiro, M. B.[1]; Anjos, J. V.[2]; Serafim, V. L.[1]; Silva, J. C. S.[1]; Scotti, L.[3]; Mendonça Junior, F. J. B.[1],

[1]Laboratório de Síntese e Vetorização de Moléculas, UEPB, PB, Brazil. [2]Departamento de Química Fundamental, UFPE, PE, Brazil. [3]Centro de Biotecnologia, UFPB, PB, Brazil.

OSPS-122 **Antitumor activity of cycloalkyl[b]thiophenes derivatives against laryngeal**

carcinoma cell line

Santos, J. C. S.[1]; Dantas, N.[1]; Moura, R. O.[1]; Militão, G. C,[2]; Mendonça Junior, F. J. B[1],*
[1]Laboratório de Síntese e Vetorização de Moléculas, UEPB, PB, Brasil; [2]Departamento de antibióticos, UFPE, PE, Brasil.

OSPS-123 **Synthesis and Evaluation of Antitumor Activity of Unpublished Phthalimides-Thiazolyl-Hydrazones**

*Barbosa, M. O.[1]; Gomes, P. A. T. M.[1]; Oliveira, A. D. T.[1]; Leite, A. C. L.[1]; Siqueira, L. R. P[1]; Moreira, D. R. M.[1]; Silva, E. B.[1]; Oliveira Filho, G. B.[1]; Pessoa, C. Ó.[2]; Ferreira, P. M. P.[2]; Costa, P. M.[2].
[1]Laboratório de Planejamento em Química Medicinal (LpQM), UFPE; [2]Laboratório Nacional de Oncologia Experimental, UFC-CE.

OSPS-124 **Direct Functionalization of Indolizines aiming synthesis of bioactive compounds**

Amaral, M. F. Z. J.; Souza, C. R; Clososki, G. C;*
Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto-USP, SP-Brazil.

OSPS-125 **Antinociceptive activity of 2-amine-4,5,6,7-tetrahydro-benzo[b]thiophene-3-carbonitrile (6CN) thiophene derivative**

Monte, L.O.[1]*; Penha, A.R.S.[1]; Pereira, C.K.S.[1]; Salgado, P.R.R.[1]; Salvadori, M.G.S.S.[1]; Oliveira, A.M.F.O.[3]; Moura, R.O.[2]; Mendonça-Junior, F.J.B.[2]; Almeida, R.N.[1]; Assis, T.S.[4]
[1]PPG Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos, UFPB; [2]Laboratório de Síntese e Vetorização de Moléculas, UFPB; [3]Universidade Federal de Campina Grande, [4]Departamento de Fisiologia e Patologia, UFPB.

OSPS-126 **Synthesis and Biological Evaluation of Novel Antihypertensive Compounds**

Robello, L. G.[1]; Huber, P. C.[1], Baraldi, P. T.[1]*;; Ronchi F. A.[2]; Fernandes A. B.[2]; Reis, R. [1,2]; Casarini, D.E.[1,2]*
[1]Vita Nova Institute, Laboratory of Organic Synthesis, Hortolândia, SP, Brazil. [2]Nephrology Division, Department of Medicine, UFSP, SP, Brazil

OSPS-127 **Synthesis and Evaluation of Anti-Trypanosoma cruzi Activity of Unpublished thiazolyl-Hydrazones**

*Gomes, P. A. T. M.[1]; Leite, A. C. L.[1]; Siqueira, L. R. P.[1]; Moreira, D. R. M.[1]; Oliveira, A. D. T.[1]; Oliveira Filho, G. B.[1]; Barbosa, M. O.[1]; Oliveira, A. R.; Santos, T.A.R.[2]; Silva, A.C.[2]; Rocha, L.F.[2]; Pereira, V.R.A.[2]
[1]Laboratório de Planejamento em Química Medicinal/LpQM, UFPE; [2]Laboratório de Imunogenética, CPqAM, FIOCRUZ, PE.

OSPS-128 **A new hidrazones' family as inhibitors of Candida albicans exoenzymes production**

Carvalho, P. H. A.[1]*; Duval, A. R.[2]; Cunico, W. J.[2]; Lund, R. G.[3].
[1]NuQuiA/Núcleo de Química Aplicada, Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos/CCQFA, UFPel, RS, Brazil; [2]Laboratório de Microbiologia Oral, Faculdade de Odontologia, UFPel, RS, Brazil.

OSPS-129 **Evaluation of the anxiolytic and sedative activity of 2-amino-4,5,6,7-**

tetrahydro-benzo [b] thiophene-3-carbonitrile

Penha, A.R.S.[1]; Pereira, C.K.S.[1]; Salgado, P.R.R[1].; Salvadori, M.G.S.S.[1]; Moura, R.O.[2] Mendonça-Junior, F.J.B[2]; Almeida, R.N;[1] Assis, T.S.1,[3]

[1]Programa de Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos, UFPB; [2]Laboratório de Síntese e Vetorização de Moléculas, UEPB, [3]Departamento de Fisiologia e Patologia, UFPB.

OSPS-130 Antinociceptive activity of the ethanolic extract of Herisantia tiubae (K.Schum) Brizicky

*Pereira, C. K. S.[1]; Oliveira, A. M. F.[2], Penha, A. R. S.[1]; Salgado, P. R. R.[1], Matias, W. N.[1]; Souza, M. F. V.[1]; Assis, T. S.[3]; Almeida, R. N.[1].

[1]PPG Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos, UFPB. [2]Unidade Acadêmica de Ciências da Vida, Universidade Federal de Campina Grande. [3]Departamento de Fisiologia e Patologia, UFPB.

OSPS-131 Synthesis of 2-arylidene-1-α-tetralone and evaluation of the inhibitory activities of PtpA and PtpB from Mycobacterium tuberculosis and YopH of Yersinia sp

Queiroz, G. S.[a,c]*; Martins, P. G. A[b]; Chiaradia, L. D.[a,b]; Yunes, R. A.[a]; Terenzi, H.[b]; Brighente, I. M. C.[c]; Nunes, R. J.[a]

[a]Laboratório Estrutura e Atividade, QMC-CFM; [b]Centro de Biologia Molecular Estrutural (CEBIME); [c]Laboratório de Química de Produtos Naturais, QMC-CFM; UFSC, SC, Brasil.

OSPS-132 Enantioselective synthesis of α- methyl-β-hidroxyesters catalysed by Saccharomyces cerevisiae

Silva, R. M.; Otani, G. M.; Clososki, G. C.*

FCFRP- USP, Ribeirão Preto-SP-Brazil

OSPS-133 Antimalarial Activity and Mechanisms of Action of Two Novel 4-Aminoquinolines against Chloroquine-Resistant Parasites

Santos, R.M.*[3]; Aguiar, A.C.C.[1,2]; Figueiredo, F.J.B.[1]; Krettli, A.U.[1,2]; Meneghetti, M.R.[3].

[1]Centro de Pesquisas René Rachou, Fundação Oswaldo Cruz, MG, Brazil. [2]PPG Medicina Molecular, UFMG, MG, Brazil. [3]Instituto de Química e Biotecnologia, UFAL, Brazil.

OSPS-134 Synthesis and Antifungal Activity of 2-amino-thiophene derivatives

Cruz, R. M. D.[1,2]; Lima, E. O.[2], De Moura, R. O.[1], De Araújo, R. S. A.[2], Mendonça Junior, F. J. B.[1]*;

[1]Laboratório de Síntese e Vetorização de Moléculas, UEPB, Brazil; [2]CBIOTEC, UFPB, Brazil.

OSPS-135 Synthetic and mechanistic study of halogenated aryl compounds with potential biological action

Silveira, I.O.M.F.; Meza, A.; Khodyuk, R.G.D.; Lima, D.P.; Gomes*, R.S.; Beatriz, A.

SINTMOL-Synthesis and Transformation of Organic Molecules Laboratory, UFMS, MS, Brazil.

OSPS-136 Leishmanicidal activity and structure of the novel [Pd(dmba)Cl(4cnpy)]

organometallic compound

Souza[1]*, R. A. de; Martinez[2], I.; Castellano[3], E. E.; Graminha[2], M.; Mauro[1], A. E.
[1]UNESP, IQ, Araraquara, SP, Brazil. [2]UNESP, Faculdade de Ciências Farmacêuticas, Araraquara, SP, Brazil. [3]Instituto de Física de São Carlos, USP, SP, Brazil

OSPS-137 **Antibacterial activity evaluation of nitrocoumarin compounds**

Araújo, R. S. A.[1]; da Cruz, R. M. D.[1]; Falcão-Silva, V. S.[1]; Siqueira-Junior, J. P.[1]*; Mendonça Junior, F. J. B.[2]; Barbosa Filho, J. M.[1]*
[1]PPG Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos, UFPB, PB, Brasil; [2]Laboratório de Síntese e Vetorização de Moléculas, UEPBPB.

OSPS-138 **Antimycobacterial activity of fatty isoniazid derivatives from renewable fatty acids**

Rodrigues, M. O.;[1]* Soares, K. L.;[1] Cantos, J. B.;[2] Silva, P. A.;[2] Piovesan, L. A.;[1] D'Oca, M. G. M.[1]
[1]Laboratório Kolbe de Síntese Orgânica – FURG, RS. [2]Laboratório de Micobacteriologia – FURG, RS.

OSPS-139 **Design, synthesis and Gpx-like activity of imidazolic thio- and seleno-Urea derivatives of dihydropyrimidines: potential pharmacologically active hybrids.**

Dambrowski, D.; Canto, R. F. S.*; Nascimento, V.; Braga, A. L.
Departamento de Química, UFSC, SC, Brasil.

OSPS-140 **Synthesis of Tetronic Acid Derivatives and Six-membered Analogues. Evaluation of the Inhibition of Protein Tyrosine Phosphatases**

Carneiro, V. M. T.; Fonseca, E. M. B.; Scorsato, V.; Dias, M. P.; Aparicio, R.; Pilli, R. A.*
Institute of Chemistry, UNICAMP, SP, Brazil

OSPS-141 **Goniothalamin analogs inhibit growth and adhesion of human pancreatic cancer cells**

Pelizzaro-Rocha, K. J.[1]; Ferreira, C. V.[1]; Barcelos, R. C.[2]; Pilli, R. A.[2]*
[1]Instituto de Biologia, UNICAMP, SP, Brazil. [2]Instituto de Química, UNICAMP, SP, Brazil.

OSPS-142 **Design and Synthesis of Chimeric Molecules Based on Caffeic Acid,Goniothalamin and Piplartine with Enhanced Antiproliferative Activity**

Barcelos, R. C.;[1] Pastre, J. C.;[1] Vendramini-Costa, D. B.,[2] De Carvalho, J. E.[2], Pilli, R. A.[1],*
[1]Instituto de Química, UNICAMP, SP, Brazil. [2]Centro Pluridisciplinar de Pesquisas Químicas, Biológicas e Agrícolas - CPQBA, UNICAMP, SP, Brazil

OSPS-143 **Xanthenones as new cholinesterase inhibitors: synthesis, in vitro studies and molecular modeling**

de Aquino, R.A.N[1].; da Silva, D.L., Modolo, L.V.[2]; de Fátima, A.[1]
[1]Grupo de Estudos em Química Orgânica e Biológica (GEQOB), ICEx, UFMG, MG. [2]Grupo de Estudos em Bioquímica de Plantas (GEBioPlan), ICB, UFMG, MG.

OSPS-144 **Design and Evaluation of p-Aminophenol and Salicylates Derivatives as Free-Radical Scavenger**

Borges, R. S.[1,2,3]*; Pereira, G. A. N.[1,3]; Vale, J. K. L.[1]; França, L. C. S.[1]; Monteiro, M. C.[1]; Alves, C. N.[3]; da Silva, A. B. F.[2]
[1]Núcleo de Estudos e Seleção de Biomoléculas da Amazônia, ICS, [2]Laboratório de Planejamento e Desenvolvimento de Fármacos, UFPA, PA, Brasil. [3]Instituto de Química de São Carlos, USP, SP, Brasil.

OSPS-145 **Preliminary studies on the interaction of a ruthenium-ibuprofen antitumor metallodrug with human serum apotransferrin**

Sanches, R. N. F.*; de Oliveira Silva, D.
Instituto de Química, USP, SP, Brasil.

OSPS-146 **Modulation of Drug Resistance in Staphylococcus aureus by Umbelliferone derivatives**

Da Cruz, R. M. D.[1]*; Falcão-Silva, V. S.[1]; Araújo, R. S. A.[2]; Mendonça Junior, F. J. B.[2]; Barbosa Filho, J. M.[3]; Siqueira-Júnior, J. P.[1]
[1]Laboratório de Genética de Microrganismos, UFPB, Brazil; [2]Laboratório de Síntese e Vetorização de Moléculas, UEPB, Brazil; [3]PPG Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos, UFPB.

OSPS-147 **Synthesis of selenazolines and its biological evaluation as cruzipain inhibitors.**

Pizzo, C.[a]; Salinas, G.[b]; Mahler, S. G.[a]*
[a]Cátedra de Química Farmacéutica, DQO, Facultad de Química, Universidad de la República (UdelaR), Montevideo, Uruguay. [b]Cátedra de Inmunología, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay.

OSPS-148 **Antinociceptive activity of Myrtenol: a terpenoid alcohol**

Simões, S.M.Q.[1,2]; Salvadori, M.G.S.S.[2,3] *; Penha, A.R.S.[2,3]; Salgado, P.R.R.[2,4]; Fonseca, D.V.[2,3]; Sousa, D.P. [5]; Almeida, R.N. [2,3,4,6]
[1]Curso de Farmácia, UFPB, [2]Laboratório de Psicofarmacologia, UFPB,[3] PPG Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos, [4]PPG Desenvolvimento e Inovação Tecnológica em Medicamentos, [5]Departamento de Fisiologia, UFS, [6]Departamento de Fisiologia e Patologia,CCS/UFPB;

OSPS-149 **LASSBio-881: a multi-target ligand with CB1 inverse agonist activity**

*Santana, P.H.D.S[1]; Mesquita, C.M.[1]; Santos, M.H.L[1]; Pinheiro, F.M.L.[1]; Miranda, C.O.[1]; Barreiro, E.J.[2]; Fraga, C.A.M.[2]; Neves, G.[1]; Castro, N.G.[1]; Guimarães, M.Z.P.[1]
[1]Laboratório de Farmacologia Molecular, ICB, UFRJ; [2]LASSBio, Faculdade de Farmácia, UFRJ.

OSPS-150 **Investigation of the possible mechanism of action of antinociceptive activity of Farnesol**

Santos, A. K. F.[1]*, Simões, S. M.[1], Pereira, W.B.[1], Benedito, R.B.[1], Junior, W.M.D.[1], Torres, P.A.[1], Morais, L.C.S.L.[1], Sousa, D.P.D.[2], Diniz, M.F.F.[1], Almeida, R.N.[1]*
[1]Laboratory of Pharmaceutical Technology, UFPB, Brazil. [2]Department of Physiology, UFSE, Brazil.

OSPS-151 **Synthesis of 1,4-biaryl, 1,4-diol but-2-ynes as a potential trypanocidal compounds**

Carvalho, M. R.[1]*; Chierrito, T.P.C.[1]; Bernardes, L.S.C.[2]; Carvalho, I.[1]
[1]Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto, USP-SP, Brasil; [2]Departamento de Ciências Farmacêuticas, CCS, UFSC, SC, Brasil.

OSPS-152 Synthesis and trypanocidal activity of new 1,3,4-triazole derivatives prepared from natural piperine.

Franklim, T. N.[1]; Lima, M. E. F.[1]; Freire-de-Lima, L.[2]*
[1]Department of Chemistry - ICE, UFRRJ. RJ. [2]Biophysics Institute Carlos Chagas Filho - UFRJ.

OSPS-153 Design and synthesis of capsaicin-like sulfonamide analogues as potential antitumor agents

Tavares, M.T.[1]; Ferreira, A.K[2]; Parise-Filho, R[1]*.
[1]Laboratory of Design & Synthesis of Bioactive Substances, USP, SP, Brazil. [2]Laboratory of Biochemical & Biophysics, Butantan Institute, SP, Brazil.

OSPS-154 Synthesis and Antioxidant Effects of Thiazolidine-2-Thiohydantoin

*Lima T.L.[1]; Miolo, L.M.F.[1]; Gerszon, M.F.B.[2]; Casaril, A.[2]; Castro, M.[2]; Savegnago, L.[2]; Schneider, P.H.[1].
[1]Instituto de Química, UFRGS, RS, Brazil, [2]Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos, PPGQ.

OSPS-155 Synthesis of partial agonists of the subtype α9α10 nicotinic acetylcholine receptor.

[1]Tobias, S.; [1]Pérez, E. G.; [2]Boffi, J. C. [2]Elgoyhen, A. B.
[1]Facultad de Química, PUC, Santiago, Chile. [2]INGEBI, Consejo nacional de investigaciones científicas y técnicas, Bueno Aires, Argentina.

OSPS-156 Acute toxicological study of the anticancer candidate LaSOM 65 after intravenous and oral administrations to Wistar rats

Torres, B.G.S.[1]*; Uchôa, F.D.T.[2]; Canto, R.F.S [1]; Dallegrave, E.[3]; Eifler-Lima, V.L.[4]; Dalla Costa, T.[1,2]
[1]PPG Ciências Farmacêuticas, UFRGS; [2]Centro Bioanalítico de Medicamentos, UFRGS; [3]CIT/RS, FEPPS; [4]Laboratório de Síntese Orgânica e Medicinal/LaSOM, UFRGS.

OSPS-157 Synthesis and evaluation of azepane derivatives with potential anti-viral activity

Aragão-Leoneti, V.,[1],* Zamoner, L. O. B.,[1] Rodrigues, E. S.,[2] Kashima, S.,[2] Carvalho, I.[1]
[1]Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto/USP, SP, Brazil. [2]Hemocentro de Ribeirão Preto, SP, Brazil.

OSPS-158 Synthesis and evaluation of the inhibitory activity of neolignans and derivatives against acetylcholinesterase

Souza, V. A.*; Moraes, M. C.; Vanzolini, K. L.; Cass, Q. B.; Corrêa, A. G.
Chemistry Department, UFSCar, SP, Brazil.

OSPS-159 Synthesis of Novel Heterocycles with Potential Activity Against Tuberculosis and Cancer.

Chazin, E.L.[1]; Facchinetti, V.[1,2]; Vellasco Júnior, W. T.[1,2]; Guimarães, F.A.[1]; Gomes, C.R.[2]; Souza, M.V.[2]; Lourenço, M.C.S.[3]; Vasconcelos, T.R.A.[1]*
[1]UFF, IQ/GQO, RJ, Brazil. [2]Fiocruz/Farmanguinhos, RJ, Brazil. [3]Fiocruz/IPEC, RJ, Brazil.

OSPS-160 **Anti-mosquito properties of novel synthetic 3,6-dihydropyrimidine analogues**
Venugopala, K. N*; Chalannavar, R. K.; Odhav B.
Department of Biotechnology and Food Technology, Durban University of Technology, South Africa

OSPS-161 **Synthesis of pyranoquinolines derivatives with pharmacological potential for use as anticancer drug.**
Silva, B. H. S.*; Martins, L. M.; Silva-Filho L. C.
Laboratory of Organic Synthesis and Catalysis, POSMAT, UNESP-Bauru, SP.

OSPS-162 **Synthesis and biological evaluation of hybrid compounds dithiolethione-chalcone as potential chemopreventive agents**
Couto, M.; de Ovalle, S.; Cabrera, M.; Cerecetto, H.; González, M.
Grupo de Química Medicinal, Laboratorio de Química Orgánica, Facultad de Ciencias-Facultad de Química, UdelaR. Montevideo, Uruguay

OSPS-163 **Synthesis of mutual prodrug with therapeutic potential anti-psoriasis**
Victorelli, F.D.[1]; Picolini, V.M.[1]; Corrêa, M.A.[2]; Chorilli, M.[3]; Silva, M.[1]*
[1]Lapdesf – Lab. de Pesquisa e Desenvolvimento de Fármacos - UNESP - Araraquara-SP. [2]LaCos – Laboratório de Cosmetologia - UNESP - Araraquara-SP. [3]Lab. Tecnologia Farmacêutica - UNESP - Araraquara-SP – Brasil.

STRATEGIES IN DRUG DESIGN

Code **Title**

SDD-54 **Structure-Activity Relationship and Molecular Docking Studies of New Amodiaquine Analogues into Heme: an Approach to Malaria Treatment**
Sousa, A.C.[1]*; Magalhães, U.O.[1]; Honório, T.S.[1]; Amaral, L.H.[3]; Castro, H.C.[4]; Cabral, L.M.[3]; Albuquerque, M.G.[2]; Rodrigues, C.R.[1]
[1]ModMolQSAR, Faculdade de Farmácia, UFRJ; [2]LabMMol, Instituto de Química, UFRJ; [3]LabTif, Faculdade de Farmácia, UFRJ; [4]LaBiEMol, Instituto de Biologia, UFF.

SDD-55 **Docking of Dihydropyrimidine-2-(thi)ones in Human Ecto-5'-Nucleotidase as Potential Anti-Cancer Drugs for Brain Tumors**
Young, A.F.[1]; Hoelz, L.V.B.[1]; Janarelli, F.E.[2]; Huber, P.F.C.[2]; Figueiró, F.[3]; Battastini, A.M.O.[3]; Russowsky, D.[4]; Eifler-Lima, V.L.[2]; de Alencastro, R.B.[1]; Albuquerque, M.G.*[1]
[1]Instituto de Química – UFRJ; [2]LaSOM-Laboratório de Síntese Orgânica Medicinal–UFRGS; [3]Departamento de Bioquímica – UFRGS; [4]Instituto de Química – UFRGS.

SDD-56 **Development and validation of 3D pharmacophore models for virtual screening of InhA inhibitors**
Bueno, R. V.[1]*; Braga, R. C.[1,2]*; Andrade, C. H.[1]
[1]Laboratório de Modelagem Molecular (LabMol), Faculdade de Farmácia, UFGO,

Brazil. [2]Laboratório RMN, Instituto de Química, UFGO, Brazil.

SDD-57 **Docking Study of Topoisomerase Inhibition by Ureas and Thioureas: DNA and ATP Binding Sites**

Cistia, C. N. D.; Santos, C. E. R.; Esteves-Souza, A.; Echevarria, A.; Sant'Anna, C.
Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, UFRRJ.

SDD-58 **Hologram QSAR studies of 4-[(diethylamino)methyl]-phenol derivatives as acetylcholinesterase/butyrylcholinesterase inhibitors**

Souza, S. D.[1]; Santana, T. E. A.[1]; Souza, A. M. T.[1]; Sousa, A. C. C.[1]; Cabral, L. M.[2]; Albuquerque, M. G.[3]; Castro, H. C.[3]; Rodrigues, C. R.[1]*
[1]Laboratório de Modelagem Molecular e QSAR3D, UFRJ; [2]Laboratório de Tecnologia Industrial Farmacêutica (LabTIF), UFRJ; [3]Laboratório de Bioquímica, Ensino e Modelagem Molecular (LABiEMol), UFF.

SDD-59 **Phase I Metabolism Studies of Flavonoids based on Ligand and Structure Computational Strategies**

Cintra, B.A.S.*[1]; Braga, R.C.[1,2]; Andrade, C.H.[1]
[1]Laboratório de Modelagem Molecular (LabMol), Faculdade de Farmácia, UFGO–GO, Brazil. [2]Instituto de Química, UFGO – GO, Brazil.

SDD-60 **Docking studies between natural peroxides and homology model of Ca^{2+}-ATPase Plasmodium falciparum (PfATP6)**

Santos, E.[1,2]*; Almeida, L. C.[1]; Santana, C. S.[1,2]; Leite, F. H. A.[1,2]; Santos Júnior, M. C.[1,2]; Taranto, A. G.[3]
[1]Programa de Pós-Graduação em Recursos Genéticos Vegetais, [2]Laboratório de Modelagem Molecular (LMM); [1,2]Universidade Estadual de Feira de Santana, Brazil, [3]Universidade Federal de São João del Rei.

SDD-61 **Pharmacophore-based studies on a series of MCH1R Antagonists**

Lima [1], E. F*.; Honório[1,2], K. M.
[1]Escola de Artes, Ciências e Humanidades, USP, SP, Brazil. [2]Centro de Ciências Naturais e Humanas, UFABC, Santo André, Brazil.

SDD-62 **Docking studies of potential inhibitors of dihydrofolate reductase from Coxiella burnetii.**

Souza, F. R.*[1]; Guimarães, A. P.[1]; Freitas, M. P.[2]; França, T. C. C.[1]
[1]Laboratory of Molecular Modeling Applied to the Chemical and Biological Defense, IME, RJ, Brazil. [2]Chemistry Department, Federal University of Lavras, Brazil.

SDD-63 **Discovery, structure-activity relationships and molecular modeling of a series of thiosemicarbazone rhodesain inhibitors**

Villela, F.S.[1]; Fonseca, N.C.[2]; Souza, T.B.[2]; Alves, R.J.[2]; Caffrey, C.[3]; Oliveira, R.B.[2]; Ferreira, R.S.[1]*
[1]Dep. de Bioquímica e Imunologia, ICB-UFMG; [2]Lab de Química Farmacêutica, FaFar-UFMG, MG, Brazil; [3]Pathology Department, UCSF, CA, USA

SDD-64 **Quantum Biochemistry Description of the Human Dopamine D3 Receptor in**

Complex with the Selective Antagonist Eticlopride

Zanatta, G.[1]*; Barroso-Neto, I. L.[2]; Bambini-Junior, V.[1]; Nunes, G.[1]; Bezerra, E. M.[3]; da Costa, R. F.[4]; Caetano, E. W. S.[5]; Cavada, B. S.[2]; Freire, V. N.[4]; Gottfried, C.[1]
[1]Department of Biochemistry, UFRGS RS, Brazil; [2]Department of Biochemistry, UFCE, CE, Brazil; [3]Pharmacy Faculty, UFCE, CE, Brazil; [4]Department of Physics, UFCE, CE, Brazil; [5]Federal Institute of Education, Science and Technology, CE, Brazil.

SDD-65 **Influence of protonation states of histidine residues in the process of conformational conversion of cellular prion protein**

*Thompson, H. N.; Stassen, H.; Netz, P. A.;
Department of Physical-Chemistry, Institute of Chemistry, UFRGS, RS.

SDD-66 **Site-direct mutagenesis, expression, purification and crystallization of Trypanosoma cruzi dihydroorotate dehydrogenase**

Cardoso, I. A.*; Pinheiro, M. P.; Nonato, M. C.
Laboratório de Cristalografia de Proteínas, Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto, USP, Brazil.

SDD-67 **Development of Dengue Protease Inhibitors by Molecular Modeling**

*Godói, I.P[1]; Garcia, E.S.J[1]; Comar Jr., M[1]; Alves, R.J[2]; Mizuno, C.S[3]; Taranto, A.G[1]
[1]Campus Centro Oeste (CCO), Universidade Federal de São João Del-Rei, MG, Brasil. [2]UFMG, MG, Brasil. [3]University of New England, College of Pharmacy, Porland, USA.

SDD-68 **Experimental and DFT mechanistic studies on the design and synthesis of cationic porphyrins led to a superb SOD mimic: MnTnBuOE-2-PyP^{5+}**

Rajic, Z.;[1,2] Tovmasyan, A.;[1] Peixoto, I. N.;[3] Spasojevic, I.;[4] Santana, O. L.;[3] Ventura, E.;[3] do Monte, S. A.;[3] Rebouças, J. S.;*[3] Batinic-Haberle, I.*,[1]
[1]Department of Radiation Oncology, Duke University Medical Center, Durham, NC, USA; [2]Department of Medicinal Chemistry, Faculty of Pharmacy and Biochemistry, University of Zagreb Croatia; [3]Departamento de Química, CCEN, UFPB, Brazil; [4]Department of Medicine, Duke University Medical Center, Durham, NC, USA.

SDD-69 **Search for potential inhibitors of the UDP-N-acetylglucosamine pyrophosphorylase by in silico approaches**

Silva Júnior, J. J.* Assis, S. A.[1] Santos Júnior, M. C.[2]
*Programa de Pós Graduação em Biotecnologia, UEFS; [1]Laboratório de Enzimologia, UEFS; [2]Laboratório de Modelagem Molecular, UEFS.

SDD-70 **Pharmacophore-based virtual screening of potential inhibitors of Trypanosoma cruzi lipoamide dehydrogenase**

Viviani, L.G.*; Piccirillo, E.; Rezende, L.; Amaral, A.T.
Laboratório de QSAR e Modelagem Molecular de Compostos Bioativos, Instituto de Química, USP, SP, Brasil.

SDD-71 **QSAR models for understanding PPARδ and PPARα selectivity**

Maltarollo, V. G.[1]; Honório, K. M.[1,2]
[1]Centro de Ciências Naturais e Humanas (CCNH) - UFABC. [2]Escola de Artes, Ciências e Humanidades – USP.

SDD-72 **Comparison of Docking Approaches for Antiophidic Molecules**

Rabello, M. M.*; Hernandes, M. Z.
LQTM, Depto. Ciências Farmacêuticas, UFPE.

SDD-73 **Preparation and Validation of Analytical Potential Derivative Anti-Psoriasis**

Picolini, V.M.[1]; Victorelli, F.D.[1]; Corrêa, M.A.[2]; Chiavacci, L.A.[3]; Chorilli, M.[3]; Silva, M.[1]*
[1]Lapdesf – Lab. de Pesquisa e Desenvolvimento de Fármacos, UNESP, SP, Brasil. [2]LaCos – Lab. de Cosmetologia, UNESP, SP, Brasil. [3]Depto de Fármacos e Medicamentos, Faculdade de Ciências Farmacêuticas, UNESP, SP, Brasil.

SDD-74 **Multiple-wall lipid-core nanocapsules functionalized with Laronidase: potential application for treatment of Mucopolysaccharidosis Type I.**

Adorne, M.D.[3]*; Mayer, F.Q.[1,2]*; Bender, E.A.[3]; de Carvalho, T.G.[1,2]; Dilda, A.C.[1]; Beck, R.C.R.[3]; Guterres, S.S.[3]; Giugliani, R.; Matte, U.[1,2]; Pohlmann, A.R.[3,4]
[1]Gene Therapy Center, Experimental Research Center, HCPA, RS, Brazil. [2]Post-Graduation Program on Genetics and Molecular Biology, UFRGS, RS, Brazil. [3]Programa de Pós-Graduação Ciências Farmacêuticas, UFRGS, RS, Brazil. [4]Departamento de Química Orgânica, IQ, UFRGS, RS, Brazil.

SDD-75 **HQSAR study of a series of NK_3 receptor antagonists for schizophrenia**

Primi, M. C.*; Sá, M. M.; Rangel-Yagui, C. O.; Ferreira, E. I.; Trossini, G. H. G.
LAPEN, Department of Pharmacy, Faculty of Pharmaceutical Sciences, USP, SP.

SDD-76 **Chemometric studies on potential larvicidal compounds against Aedes aegypti**

Scotti, L.[1]*; Scotti, M. T[2]; Sócrates, C. H. C.[3]; Silva, M. S[1]; Mendonça Junior, F. J. B[4]
[1]UFPB, Centre for Biotechnology, PB, Brazil; [2]UFPB, Department of Engineering and the Environment, PB, Brazil; [3]UFSE, Pharmacy Department, Medicinal Chemistry Laboratory, SE, Brazil; [4]UEPB, Biological Science Department, Laboratory of Synthesis and Drug Delivery, PB, Brazil.

SDD-77 **Molecular Modeling and Structure-Activity Relationship Studies of Azaindole Hydroxamic Acids Derivatives, Inhibitors of HIV-1 Integrase**

Santos, M. L. A.*; Brito, M. A.
Laboratório de Química Medicinal Computacional, Faculdade de Farmácia, UFF, Niterói, RJ, Brasil.

SDD-78 **Montmorillonite as Pharmaceutical Excipient to Drugs-Carrier: Molecular Modeling and Molecular Dynamic of Drug-Clay Nanosystem**

*Bello, M. L.[1]; Souza, A. M. T.[1]; Dias, L. R. S.[2]; Castro, H. C.[3]; Cabral, L. M.[4]; Rodrigues, C. R.[1]
[1]ModMolQSAR-3D, Faculdade de Farmácia/UFRJ, RJ, Brasil. [2]LQMed, Faculdade de Farmácia/UFF, RJ, Brasil. [3]LABioMol, Instituto de Biologia/UFF, RJ, Brasil. [4]TIF, Faculdade de Farmácia/UFRJ, RJ, Brasil.

SDD-79 **Construction and validation of CCR3 and CCR4 homology models: Searching for new chemokine receptor antagonists with dual activity**

*Nascimento-Júnior, N. M. [1,2]; Romeiro, N. C.[3]; Barreiro, E. J.[1,2]; Fraga, C. A. M.[1,2,4]
[1]LASSBio, Faculdade de Farmácia, UFRJ. [2]Programa de Pós-Graduação Química, IQ, UFRJ. [3]LICC, NUPEM, UFRJ-Campus Macaé. [4]Instituto de Ciências Biomédicas, UFRJ.

SDD-80 **Tryptamine derivative sagainst Ae. aegypti (Diptera: Culicidae) larvae**

Oliveira, R. B.[a]; Santos, R. L. C.[b]; Cavalcanti, S. C. H.[a]*
[a]Medicinal Chemistry Laboratory, Department of Pharmacy, UFSE, CCBS, SE, Brazil.

SDD-81 **Molecular modeling of Piperazine-2,3-dicarboxylic acid derivatives: a series of NMDA receptor antagonists**

Abreu P. A.[1]*; Santana, M. V.[2]; Bracht, F.[3]; Albuquerque, M. G.[3]; Alencastro, R. B. [3]; Rodrigues, C. R.[4]; Castro, H. C.[2]
[1]LAMCIFAR, UFRJ, Campus Macaé; [2]LabiEMol, Instituto de Biologia, UFF; [3]LabMMol, Instituto de Química, UFRJ; RJ; [4]ModMolQSAR, Faculdade de Farmácia, UFRJ.

SDD-82 **Virtual screening of potential inhibitors of dengue virus NS2B/NS3 protease: applying pharmacophore, similarity, and docking filters.**

Piccirillo, E. *; Rezende, L.; Peron, L. M., Amaral, A. T-do
Laboratório de QSAR e Modelagem Molecular de Compostos Bioativos, IQ, USP, SP, Brasil.

SDD-83 **Conformational studies of the flavoenzyme dihydrooroate dehydrogenase using molecular dynamics simulations**

Reis, R.A.G.*; Nonato, M.C.
Laboratório de Cristalografia de Proteínas, Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto, USP, SP, Brazil

SDD-84 **Docking Studies on the hexose transporter Model PfHT, a new molecular target against malaria**

Nunes.R.R*[1]; Fonseca.A.L[1]; Alves.R.J[2]; Comar Jr.M[1]; Taranto.A.G[1]
[1]Universidade Federal de São João del Rei - MG. [2]UFMG - MG.

SDD-85 **Quantum Biochemistry of the Isoniazid Aduct INADH binding to its reductase target from Mycobacterium Tuberculosis**

Ribeiro, T. C. S.* [1]; Vieira V. M. [1]; Lyra, M. L.[1]; Freire, V. N. [2]; Costa, R. F. [2]; Bezerra, E. M. [2]
[1]Instituto de Física, UFAL, Alagoas, Brazil. [2]Departamento de Física, UFCE, Ceará, Brazil

SDD-86 **In vivo and in vitro characterization of Trypanosoma cruzi fumarases.**

*Pádua[1,4,] R. A. P.; Dyszy[2], F.; Costa-Filho[2,3,] A. J.; Wilkinson[3], S. R.; Nonato[1], M. C.
[1]Laboratório de Cristalografia de Proteínas, Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto, USP, SP, Brazil. [2]Instituto de Física de São Carlos, USP, SP, Brazil. [3]Laboratório de Biofísica Molecular, Departamento de Física, USP, Brazil. [4]Pre-Clinical and Drug Discovery Group, Queen Mary University of London, London, United Kingdom.

SDD-87 **Ligand-Based Virtual Screening Methods for Casein Kinase 1 inhibitors in Alzheimer's Disease.**

Rodrigues*, R. P.; Silva, C.H.T.P.
[1]Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto, USP, SP, Brazil.

SDD-88 **Studies on the toxicology of diphenyl diselenide as δ-aminolevulinic acid dehydratase enzyme inhibitor: in silico molecular docking and quantum biochemistry approaches**

Saraiva, R. A.[1]*, Nogara, P. A.[1]; Lugokenski, T. H. [1]; Costa, R. F.[2]; Bezerra, E. M.[2]; Freire, V. N.[2]; Rocha, J. B. T.[1].
[1]Laboratório de Bioquímica Toxicológica, UFSM, RS, Brazil. [2]Departamento de Física, UFC, CE, Brazil.

SDD-89 **External validation of 2D/3D-QSAR models: Design and synthesis of novel benzofuroxan derivatives as anti-Trypanosoma cruzi agents**

Jorge, S. D.[1],*; Palace-Berl[1], F.; Pasqualoto, K. F. M.[2]; Tavares, L. C. [1]
[1]Department of Biochemical and Pharmaceutical Technology, FCF/USP; [2]Laboratory of Biochemistry and Biophysics, Butantan Institute, SP, Brazil.

SDD-90 **Theoretical Evaluation of Spin Multiplicity and of the Protonation State of the Bridge between Ni(II) Ions in the Urease Active Site.**

Rocha, S. F. L. S.; Sant'Anna, C. M. R*.
Departamento de Química, ICE, UFRRJ.

SDD-91 **QSAR modeling of a set of compounds with affinity by TGF-β type Ireceptor (ALK5)**

Sheila C. Araujo[1]*, Vinícius G. Maltarollo[2], Káthia M. Honório[1,2]
[1]Escola de Artes, Ciências e Humanidades – USP; [2]Centro de Ciências Naturais e Humanas – UFABC

SDD-92 **3D QSAR Studies for Antagonists of AT_1 receptor**

Silva, D. C.[1]*; Honorio, K. M.[1,2]*
[1]Centro de Ciências Naturais e Humanas, UFABC, Santo André, Brazil. [2]Escola de Artes, Ciências e Humanidades, USP, São Paulo, Brazil.

SDD-93 **Comparative analysis of in silico prediction methods of intestinal absorption and oral bioavailability on drug design**

Silva, F.T.*; Trossini, G.H.G.
Faculdade de Ciências Farmacêuticas – USP, São Paulo – Brazil.

SDD-94 **Theoric Study of the proton relay pathway in class 1A Dihydroorotate Dehydrogenase from Lactococcus lactis.**

Silva, N. F.[1]*; Lameira, J.[1]; Alves, C. N.[1]; Martí, S.[2]; Moliner, V.[2]
[1]Laboratório de Planejamento e Desenvolvimento de Fármacos, UFPA, PA, Brazil. [2]Departamento de Fisica Quimica y Analitica, Universidad Jaume I, Castellon, Spain.

SDD-95 **Theoretical Study of the hOGT protein complexed with the substrate UDP-GlcNAc by molecular Modeling Technique**

Pinheiro, S.S[1].*; Nascimento, S. B[1].; Silva, N. S[1].; Silva, R. C[1].; Silva, A. P[1].; Ramos, F. C[1].; Santos, A. M[1].; Miranda, R. M[2].; Lima, A. H[1].; Oliveira, R. L. S[1].; Silva, J. L[1].; Alves, C. N[1].

[1]Instituto de Ciências Exatas e Naturais – Departamento de Química - Laboratório de planejamento e Desenvolvimento de Fármacos – LPDF-UFPA. [2]Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Pará, Departamento de Química, PA, Brasil.

SDD-96 **Docking Studies of 4-[(diethylamino)methyl]-phenol derivatives as acetylcholinesterase inhibitors**

Souza, S. D.[1]; Mendonça, L.S.[1]; Souza, A. M. T.[1]; Vieira, B.A.; Sousa, A. C. C.[1]; Sodero, A.C.R.[1]; Cabral, L. M.[2]; Albuquerque, M. G.[3]; Castro, H. C.[3]; Rodrigues, C. R.[1]*
[1]Laboratório de Modelagem Molecular e QSAR3D, Faculdade de Farmácia, UFRJ; [2]Laboratório de Tecnologia Industrial Farmacêutica (LabTIF), Faculdade de Farmácia, UFRJ; [3]Laboratório de Bioquímica, Ensino e Modelagem Molecular (LABiEMol), UFF.

SDD-97 **Docking Studies on Glycoside Derivatives with Antitumoral Activity**

Oliveira, S.M.F. de*; Comar Jr., M.; Barbosa, L.A. de O.; Villar, J.A.F.P.; Taranto, A.G.
Universidade Federal de São João Del Rei – Centro-Oeste, Divinópolis-MG.

SDD-98 **Insights into the molecular mechanism of action of a new inhibitor of p53:MDM2 interaction**

Paiva, A.[1]; Leão, M.[2]; Machado, N.[1]; Palmeira, A.[1]; Soares, J.[2]; Pereira, C.[2]; Ferreira-da-Silva, F.[3]; Gales, L.[3,4], Pinto, M.[1]; Saraiva, L.[2]*; Sousa, E.[1]*
[1]CEQUIMED-UP, Laboratory of Organic and Pharmaceutical Chemistry, Faculty of Pharmacy, University of Porto, Portugal. [2]REQUIMTE, Laboratory of Microbiology, Faculty of Pharmacy, University of Porto, Portugal; [3]IBMC – Instituto de Biologia Molecular e Celular, Portugal; [4]ICBAS – Instituto de Ciências Biomédicas de Abel Salazar, Universidade do Porto, Portugal.

SDD-99 **Docking between dinitroaniline sulfonamides and Leishmania donovani α-β Tubulin**

Assis*, T. M.; Mancini, D. T.; Assis, L. C. ; Cunha, E. F. F.
Federal University of Lavras - Department of Chemistry, Lavras/ MG.

SDD-100 **Efavirenz bioavailability prediction based on physical-chemical and formulation factors**

*Honorio, T.S.[1]; Pinto, E.C.[3]; Sousa, A.C.C.[1]; Amaral, L.H.[2]; Cabral L.M.[2], Carla, H.C.[4]; Rodrigues, C.R.[1]
[1]LabMol QSAR-3D, UFRJ; [2]LABTIF, Cidade Universitária, UFRJ; [3]LABCQ, UFRJ, [4]LABiEMol, UFF.

SDD-101 **CoMSIA analyses for substances with affinity by PPARδ and related to metabolic disorders**

Maltarollo, V. G.[1] and Honório, K. M.[1,2]
[1]Centro de Ciências Naturais e Humanas (CCNH) - UFABC; [2]Escola de Artes, Ciências e Humanidades - USP.

SDD-102 **Rational design and solid-phase synthesis of novel benzimidazole derivatives as potential cruzipaín inhibitors.**

Ríos, N [a]; Varela, J [a]; González , M [a]; Cerecetto, H [a]; Merlino, A [b],* ; Porcal, W [a],*.
[a]Grupo de Química Medicinal, Laboratorio de Química Orgánica, Facultad de Ciencias-

Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay. [b]Laboratorio de Química Teórica y Computacional, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

MEDICINAL CHEMISTRY OF NATURAL PRODUCTS

Code **Title**

MCNP-42 **Alkaloids isolated from Brazilian Lycopodiaceae species and their anticholinesterasic activities**

Konrath, E. L.[1]*; Ortega, M. G. [2]; Cabrera, J. L. [2]; Henriques, A. T. [1] *
[1]UFRGS, Programa de Pós Graduação Ciências Farmacêuticas, RS, Brazil; [2]Farmacognosia, Depto de Farmácia, Fac. de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina.

MCNP-43 **Comparative study of antimicrobial activity of extract of tannin Anacardium occidentale Linn. about bacteria dental biofilm**

Peixoto, M. S.*; Pereira, M. S. V.; Pereira, J. V.; Higino, J. S.; Pereira, A. V.; Araújo, C. R. F.; Menezes, K. M.; Cavalcanti, V. M.; Medeiros, K. L.
Universidade Federal da Paraíba – UFPB

MCNP-44 **Cancer chemoprevention activity of prenylated chalcones**

Morais, M. C. C.[1,2]; Kondratyuk, T. P.[2]; Park, E. J.[2]; Pezzuto, J. M.[2]; Dutra, L. A.[3]; Regasini, L. O.[3]; Bolzani, V. S.[3]; Soares, C. P.[1],*
[1]School of Pharmaceutical Sciences, UNESP, SP, Brazil. [2]College of Pharmacy, University of Hawaii, USA. [3]NuBBE, Institute of Chemistry, UNESP, SP, Brazil.

MCNP-45 **Characterization and anxiolytic activity of essential oil of Citrus limon (L.) Burm. f. in open-Field test**

Viana, M.D.M.[1]*; Cardoso, R.M.[1]; Silva, N.K.G.T.[1]; Silva, D. F.[1]; Falcão, M.A.P.[1]; Silva, W.L.[2]; Sant'Ana, A.E.G.[2]; Alexandre-Moreira, M.S.[1]; Campesatto, E.A.[1]
[1]Laboratório de Farmacologia e Imunidade, UFAL. [2]Laboratório de Pesquisa em Recursos Naturais, Instituto de Química e Biotecnologia, UFAL.

MCNP-46 **Bioactive diterpenes isolated from Croton grewioides Baill.**

Medeiros, V. M.*; Fernandes, H. M. B.; Maciel, R. S. S.; Leão, A. D.; Tavares, J. F.; Barbosa-Filho, J. M.; Silva, M. S.
Centro de Ciências da Saúde, Universidade Federal da Paraíba.

MCNP-47 **Study of cytotoxic activity and enzymatic of Erythroxylum suberosum (Erythroxylaceae) ethanolic extracts.**

Nascimento, M. N. G.[1]*; Junqueira, J. G. M.[1]; Vieira, P. C.[2]; Silveira-Lacerda, E.[3]; Severino, R. P.[1]
[1]Departamento de Química, UFGO. [2]Departamento de Química, UFSCar. [3]Instituto de Ciências Biológicas, UFGO.

MCNP-48 **Antioxidant effect of essential oil of the flowers and leaves of Tagetesminuta**

Castro, M. [1,2]*; Oliveira, D.H.[1]; Martinez, D.[1,2]; Schiedeck, G.; Alves, D.[1]; Savegnago, L. [2] ; Jacob, R.G.[1]

[1]Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos - Laboratório de Síntese Orgânica Limpa - LASOL - UFPel - Brazil. [2]Centro de Desenvolvimento Tecnológico - CDTec, GPN - UFPel - Brazil. [3]EMBRAPA- Clima Temperado.

MCNP-49 **Modulatory effect of Solanum lycocarpum against DNA damage in Swiss mice hepatocytes**

Munari, CC*; Oliveira, PF[1]; Leandro, LF[1]; Ferreira, NH[1]; Bastos, JK[2]; Tavares, DC[1].

[1]Universidade de Franca, São Paulo; [2]FCFRP – USP, Ribeirão Preto, São Paulo.

MCNP-50 **Analysis of the inhibitory activity of Passiflor acincinnata Mast on Candida albicans, Candida kruzei, Candida tropicalis.**

Oliveira, L.R.*[1]; Siebra, A.L.[1] ;Kerntopf, M.R.[2]; Coutinho, H.[2]; Menezes, I.[2]; Costa, J.G.[1,2,3]; Souza, N.K.[3]; Souza, D.[1]; Guedes, G..[3]; Rodrigues, C.K.[3]; Sales, V.S.[3].

[1]Post Graduate Program in Molecular Bioprospecting – Regional University of Cariri; Brazil.*[2]Regional University of Cariri. DBC – Department of Biological Sciences; Brazil. [3]Nursing in Graduate – Regional University of Cariri; Brazil.

MCNP-51 **The characterization of an enriched saponin fraction from mate (Ilex paraguariensis A. St. Hil.) unripe fruits and its related effects on the lipid metabolism of Wistar rats**

Resende, P.E.[1]; Verza, S.G.[1]; Kaiser, S.[1], Pittol, V.[1]; Kucharski, L.C.R. [2]; Ortega, G.G.[1]

[1]Laboratório de Desenvolvimento Galênico, Faculdade de Farmácia, UFRGS. [2]Laboratório de Metabolismo e Endocrinologia Comparada, ICBS, UFRGS

MCNP-52 **Effect of Psidium species extracts on malaria causing mosquito Anopheles arabiensis**

Chalannavar, R.K.; Venugopala, K.N.; Odhav, B

Department of Biotechnology and Food Technology, Durban University of Technology, Durban 4001, South Africa.

MCNP-53 **Vasodilatory Activity of neolignan from Piper rivinoides**

Paiva, R.A.[1]*; Marques, A.M.[1]; Moreira, D.L.[3]; Aguiar, A.K.N.[2]; Pereira, S.L.[2]; Sudo, R.T.[2]; Sudo, G.Z.[2]; Kaplan, M.A.C[1].

[1]Núcleo de Pesquisa de Produtos Naturais, CCS, UFRJ, RJ. [2]Instituto de Ciências Biomédicas, CCS, UFRJ, RJ. [3]Farmanguinhos – Fiocruz, RJ.

MCNP-54 **Effect of the oral administration of the essential oil of Eugenia uniflora leaves on the ear edema induced by croton oil in mice**

Anversa, R.[1]*; Victoria, F. N.[2]; Martinez, D. M.[2]; Lenardão, E. J.[3]; Savegnago, L.[1]

[1]Centro de Desenvolvimento Tecnológico, Unidade Biotecnologia, UFPel, RS, Brazil. [2]Faculdade de Agronomia Eliseu Maciel, DCTA, UFPel, RS, Brazil. [3]CCQFA - Laboratório de Síntese Orgânica Limpa, UFPel, RS, Brazil.

MCNP-55 **Purification and Characterization of α-Eleostearic Acid from Tung Oil**

Sousa, R. S.*; Marques, V. G.; Lima, V. R.; Clementin, R. M.

FURG, Escola de Química e Alimentos, RS, Brasil.

MCNP-56 **Inhibitory properties of phenolic extracts of Pterocarpus soyauxii (African padauk) leaves on key enzymes linked to type-2 diabetes**

*Saliu, J. A[1,2],.; Oboh, G[2].; Atharde, M.L.[3];Rocha, J.B.T.[3]
[1]Department of Biochemistry, Adekunle Ajasin University, Nigeria. [2]Functional Foods and Nutraceutical Unit, Department of Biochemistry, Federal University of Technology, Akure, Nigeria. [3]Departmento de Quimica, Bioquimica Toxicologia, UFSM, RS, Brazil.

MCNP-57 **Synthesis of new aphidicolin analogues: Search for new drugs against Chagas´ disease**

Santos, G.B.[1]*; Emery, F.S.[1]; Andricopulo, A.D.[2]; Pupo, M.T[1].
[1]Faculty of Pharmaceutical Sciences of Ribeirão Preto, USP. [2]USP.

MCNP-58 **Antibacterial activity of the essential oils of Xylopia langsdorffiana St. &Tul. (Annonaceae)**

Santos, P.F.[1]*; Duarte, M.C.[1]; Souza, R.C.[1]; Almeida, T.S.[2]; Rodrigues, F.F.[2]; Costa, J.G.[2]; Silva, M.S.[1]; Tavares, J.F.[1]
[1]Programa de Pós-Graduação Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos, UFPB-PB, Brasil. [2]Laboratório de Pesquisa de Produtos Naturais, Universidade Regional do Cariri, CE, Brasil

MCNP-59 **Toxic Effects on and Structure-Toxicity Relationships of Terpenes and Related Compounds against Aedes aegypti Larvae**

Santos, S. R. L.[a]; Santos, R. L. C.[b]; Cavalcanti, S. C. H.[a]
[a]Medicinal Chemistry Laboratory, Department of Pharmacy; [b]Laboratory of Entomology, UFSE, CCBS, SE, Brazil.

MCNP-60 **Chemical composition and antimicrobial activity of the essential oil of Lippia microphylla Cham. (Verbenaceae)**

Madeiro, S.A.*; Medeiros, V.M.; Guerra, F.Q.; Pereira, F.O.; Lima, E.O.; Silva, M.S.; Tavares, J. F.
Centro de Ciências da Saúde, UFPB, PB, Brazil.

MCNP-61 **Biotransformation of ent-pimaradienoic acid by Aspergillus niger and antifungal evaluation of the obtained derivatives**

Severiano, M.E.[1]*; Ramos, H.P.[1]; Simão, M.R.[2]; Furtado, N.A.[1]; Said, S.[1]; Ambrósio, S.R.[2]
[1]Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto, USP - SP, Brazil. [2]Núcleo de Pesquisa em Ciências Exatas e Tecnológicas, Universidade de Franca, SP, Brazil.

MCNP-62 **Antimicrobial activity "in vitro" of the hydroalcoholic extract of leaves Passiflora cincinnata Mast. Passifloraceae.**

Siebra, A.L.*[1]; Oliveira, L.R.[1]; Braga, M.F.[1]; Kerntopf, M.R.[2]; Coutinho, H.D.[2]; Menezes, I.R.[2]; Costa, J.G.[2]; Guedes, M.M.[3]. Andrade, T.A.[3]; Coutinho, T.S.[3]; Balbino, E.[3]
[1]Post Graduate Program in Molecular Bioprospecting – Regional University of Cariri; Brazil. [2]Regional University of Cariri. DBC; Brazil. [3]University of Cariri; Brazil.

MCNP-63 **Design and In Silico Screening of a Natural Product-Based Library of Inhibitors of Trypanosoma cruzi Sterol 14α-Demethylase**

Silva, D.C.*[1]; Braga, R.C.[1,2]; Lião, L.M.[2]; Andrade, C.H.[1]

[1]Laboratório de Modelagem Molecular (LabMol), Faculdade de Farmácia, UFGO, Brazil. [2]Laboratório de RMN, Instituto de Química, UFGO, Brazil.

MCNP-64 **In silico screening of multivalent inihibitors against isoforms of serine hydroxymethiltransferase in Leishmania (Viannia) braziliensis**

Silva, F.S.[12]*; Caffarena, E.R.[2]; Pereira, B.A.S.[1]; Bourguignon, S.C.[3]; Castro, H.C.[3]; Ferreira, V.F.[4]; Alves, C.R.[1]

[1]Instituto Oswaldo Cruz, Laboratório de Biologia Molecular e Doenças Endêmicas, RJ, Brazil. [2]Fundação Oswaldo Cruz, Programa de Computação Científica, RJ, Brazil. [3]UFF, Instituto de Biologia, RJ, Brazil. [4]UFF, Instituto de Química, RJ, Brazil.

MCNP-65 **Synthesis and larvicidal activity of thymol derivatives against Aedes aegypti**

Silva, V. B.; Lima, D.T.; Santos, R. L. C.[b]; Cavalcanti, S. C. H.*

[a]Medicinal Chemistry Laboratory, Department of Pharmacy; [b]Laboratory of entomology, UFSE, CCBS, SE, Brazil.

MCNP-66 **13^2-hydroxy-(13^2-R/S)-pheophytin a: a compound with modulatory activity isolated from Sargassum polyceratium, on Staphylocuccus aureus strains.**

Lira, N.S.[1]; Ramos, R.F.[1]; Menezes-Silva, S.M.[2]; Dias, C.S.[1]; Brbosa-Filho, J.M.[1]*; Siqueira Junior, J. P.[2]

[1]UFPB, Centro de Ciências da Saúde - Programa de Pós-graduação em Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos - PB – Brasil. [2]UFPB, Centro de Ciências Exatas e da Natureza. PB – Brasil.

MCNP-67 **Chemical composition and antifungal activity of essential oil of Citrus limon against Candida albicans**

*Sousa, J.P.[1]; Queiroz, E.O.[1]; Guerra, F.Q.S.[1]; Menezes, C.P.[1]; Trajano, V.N.[2]; Souza, F.S.[2]; Lima, E. O.[1]

[1]Laboratory of Mycology, Department of Pharmaceutical Sciences, UFPB, PB, Brazil. [2]Unified Laboratory of Pharmaceutical Development and Assay, Department of Pharmaceutical Sciences, UFPB, PB, Brazil.

MCNP-68 **Evaluation of the Antichemotactic Effect of Flavonoids on Polymorphonuclear Neutrophils**

Suyenaga, E.S.[1;2]; Konrath, E.L.[3]; Dresch, R.R.[3]; Apel, M.A.[3]; Zuanazzi, J.A.[3]; Chaves, C.G.[3]; Henriques, A.T.[3]

[1]UNISINOS. Curso de Farmácia, RS, Brasil. [2]Universidade Feevale - Curso de Farmácia, RS, Brasil. [3]UFRGS. PPG em Ciências Farmacêuticas-RS- Brasil.

MCNP-69 **Synthesis of Lupeol Triazole-Based Derivatives with Potential Antimalarial Activity.**

Borgati, T. F.*[1]; Pereira, G. R [2]; Brandão, G. C.[3]; Paula, R.C.[2]; Nascimento, M. F. A [2]; Oliveira, A. B.[2]; Souza Filho, J. D.[1]

[1]Depto. de Química, ICEx, UFMG; [2]Depto. de Produtos Farmacêuticos, Faculdade de Farmácia, UFMG - MG; [3]Faculdade de Farmácia - UFOP – MG

MCNP-70 **Antitumor and antioxidant activity of Brazilian mushrooms Lentinula edodes and Pleurotussajor-caju aqueous extracts**

Finimundy, T.C.*[1]; Gambato, G.[1]; Fontana, R.[2]; Camassola, M.[2]; Salvador, M.[3], Moura, S.[4]; Hess, J.[5,6]; Henriques, J.A.P.[1]; Dillon, A.J.P[2].; Roesch-Ely, M.[1]

[1]Laboratory of Genomics, Proteomics and DNA Repair; [2]Laboratory of Enzyme and Biomass; [3]Laboratory of Oxidative Stress and antioxidant; [4]Laboratory of Essential Oils of the Biotechnology Institute, UCS, Brazil; [5]Experimental Head and Neck Oncology, University Hospital Heidelberg, Germany; [6]German Cancer Research Center, Heidelberg, Germany.

MCNP-71 **In vitro evaluation of the effect of antimicrobial Piptadenia stipulacea (benth) on Staphylococcus aureus of bovine origin**

Cavalcanti, V. M.[1]*; Medeiros, K. L.[2]; Peixoto, M. S.[2]; Pereira, A. V.[3]; Pereira, M. S. V.[2]

[1]UFPB; [2]UFPB; [3]Universidade Federal de Campina Grande (UFCG).

MCNP-72 **Coumarin and antimicrobial activity of the roots from Palicourea rigida**

Alves, V.G.[1]; Vandresen, F.[1]; Kato, L.[3]; Oliveira C.M.A.[3]; Nakamura, C.V.[2]; Silva, C.C.[1]

[1]Universidade Estadual de Maringá. Fitosin-Departamento de Química. [2]Universidade Estadual de Maringá, Departamento de Ciências Básicas da Saúde. PR, Brasil. [3]Instituto de Química, UFGO, GO.

MCNP-73 **Evaluation of antioxidant capacity and cytotoxic activity against human bladder cancer cell line of 4-methylcoumarins**

Vianna, D.R.[1]; Ruschel, L.E.[2]; Dietrich, F.[2]; Figueiró, F.[2]; Canto, R.F[1]; Bubols, G.[1]; Lanznaster, M.[3], Monserrat, J.M.[4]; von Poser, G.[1]; Garcia, S.C.[1]; Battastini, A.M.O [2]; Eifler-Lima, V. L. [1]*

[1]Grupo de Pesquisa em Síntese Orgânica Medicinal, PPGCF, UFRGS. Brazil. [2]Departamento de Bioquímica, UFRGS, RS, Brazil. [3]Programa de Pós-Graduação Ciências Fisiológicas: Fisiologia Animal Comparada. FURG, RS, Brazil. [4]Instituto de Química, UFF, RJ, Brazil. [5]UFRJ, Instituto de Química – CT, RJ, Brazil.

MCNP-74 **Evaluation of The Potencial Inhibition of Tubulin by N-Substituted Heterocyclic Piperine Derivatives**

Ferreira, W. S*[1,2.]; Souza, A. X.[2,3.]; Silva, D. R.[2]; Lima, M. E. F[2].; Sant`Anna, C.M.R[2].

[1]CEFET/RJ, [2]ICE – UFRRJ, [3]CTUR – UFRRJ.

MCNP-75 **Boldine, an alkaloid from Peumus boldus, inhibits acetylcholinesterase activity: in vitro and in silico molecular docking studies**

Nogara, P.A.[1]*; Carvalho, W.R.[2]; Klimaczewski, C.V.[1]; Saraiva, R.A.[1]; Rocha, J.B.T.[1].

[1]Laboratório de Bioquímica Toxicológica, UFSM, RS, Brazil. [2]Laboratório de Síntese de Organocalcogênios quirais e nanoestruturas com atividade biológica, UFSM, RS, Brazil.

MCNP-76 **Characterization and testing of acute toxicity and the oily fraction of bixin Bixa orellana**

Vilar, D.A.[1*]; Vilar, M.S.[1]; Guedes, E.J.R.[1]; Nunes, L.S.[1]; Gorgonio, I.F.[1]; Diniz, M.F.[2]; Barbosa, J. M.[2]

[1]PPG Development and Technological Innovation in Medicament

UFPB/UFRPE/UFC/UFRN; [2]Department of Pharmaceutical Sciences-UFPB.

MCNP-77 **The antifungal activity of Thymus vulgaris L. essential oil against Rhizopus oryzaeinvolved interaction with ergosterol**

Mota, K. S. L.[1]*; Pereira, F. O.[1], Oliveira, W. A.[2], Lima, I. O.[1], Lima, E. O.[1]
[1]Laboratory of Mycology, Department of Pharmaceutical Sciences, UFPB, Brazil; [2]Center of Education and Health, Federal University of Campina Grande, Brazil.

MCNP-78 **Phytochemical analysis, antibacterial and modulating activity of the ethanol extract and the hexane fraction of Dalbergia ecastophyllum.**

*Silva, V.A[1].; Freitas, A.F.[1].; Guerra, F.Q.[1]; Gonçalves, G.F[1]; Pessôa, H.L.[1]; Coutinho, H.D.[2]; Soares, R.S[1]; Cunha, E.V.[1]; Guedes, G.M.[2]; Freitas, M.A[2]; Lima, E.O[1].
[1]Postgraduate Program in Natural Products and Synthetic Bioactive, Health Sciences Center, UFPB, PB, Brazil. [2]Laboratory of Microbiology and Molecular Biology, Cariri Regional University, CE, Brazil.