



ESPECTRO DE ATIVIDADE BIOLÓGICA IN SILICO DE MARCADORES QUÍMICOS DA ESPÉCIE VEGETAL ALLIUM SATIVUM

BIANKA DE ALMEIDA MACEDO; VINICIUS BARRETO DA SILVA
bianka_almeida12@hotmail.com

Objetivo: Identificar o potencial biológico, dos marcadores químicos organosulfurados e flavonoides majoritários da espécie vegetal *Allium sativum*, por meio do estudo da relação estrutura-atividade, através do emprego de métodos in silico, incluindo a análise de modelos farmacofóricos. **Método:** IDENTIFICAÇÃO DAS ATIVIDADES BIOLÓGICAS DESCRITAS PARA OS MARCADORES QUÍMICOS: a primeira etapa da pesquisa consistiu na busca de informações das atividades biológicas já descritas na literatura para os flavonoides e organosulfurados. MODELAGEM DOS MARCADORES QUÍMICOS: as estruturas químicas dos marcadores de *Allium sativum* foram modeladas em representações 2D por meio do programa computacional ACD/ChemSketch Freeware Version. TRIAGEM DE BIOATIVIDADE IN SILICO: A triagem de bioatividade dos marcadores modelados foi realizada com os programas Molinspiration e, em seguida, PharmMapper. Assim, foi possível obter uma lista com possíveis atividades biológicas para os marcadores majoritários da espécie *Allium sativum*. **Resultados:** O programa Molinspiration determina se a molécula em estudo é semelhante às drogas conhecidas, ou seja, através da avaliação realizada com o programa foram obtidas as pontuações de bioatividade para os marcadores químicos flavona, pertencente à classe dos flavonoides, e alicina, pertencente à classe dos organosulfurados. Após a obtenção de baixos valores de pontuação para as atividades propostas pelo programa Molinspiration, buscou-se a utilização de um método mais robusto, a determinação de similaridade farmacofórica, a qual foi realizada com o programa PharmMapper. As possíveis aplicações terapêuticas para flavona, observou-se que as mesmas estão relacionadas com doenças neurológicas, doenças cardiovasculares, doenças do SNC e HIV. **Conclusão:** Os resultados obtidos neste estudo ajudam a comprovar a hipótese de que os compostos bioativos do alho são potencialmente benéficos à saúde, uma vez que através de métodos computacionais baseados na estrutura dos ligantes foram sugeridas várias possibilidades de atividades terapêuticas através do programa PharmMapper. O alho possui grandes propriedades terapêuticas, porém necessita-se de estudos que comprovem e avaliem o efeito da dose/resposta da espécie *Allium sativum* no organismo dos seres

Palavras-chave: *Allium Sativum*, Marcadores Químicos, Espectro De Atividade Biológica,