



ESPECTRO DE ATIVIDADE BIOLÓGICA IN SILICO DE MARCADORES QUÍMICOS DA ESPÉCIE VEGETAL RUTA GRAVEOLENS

AMANDA CLAUDIA FERREIRA AMORIM; VINICIUS BARRETO DA SILVA
amandaclaudiaamorim@gmail.com

Objetivo: O objetivo deste trabalho compreende o mapeamento do potencial biológico de marcadores químicos da espécie vegetal *Ruta graveolens*, por meio do estudo da relação estrutura-atividade, através do emprego de métodos in silico baseados em ligantes, incluindo a percepção de modelos farmacofóricos. **Método:** A primeira etapa da pesquisa foi a busca de informações das atividades biológicas já descritas na literatura para os marcadores químicos majoritários da *Ruta graveolens*. As estruturas químicas dos marcadores foram modeladas em 3D, formato mol2, e então submetidas no programa molinspiration, que explorou comparações de propriedades químicas de fragmentos moleculares presentes nos marcadores com aqueles encontrados em moléculas moduladoras de alvos importantes de drogas. Em seguida, o programa PharmMapper realizou o mapeamento farmacofórico para todos os alvos biológicos da base de dados do programa. Os dez alvos com maior pontuação "fit score" foram selecionados para análise e discussão dos modelos farmacofóricos gerados. **Resultados:** A avaliação, feita pelo programa molinspiration, das propriedades químicas de fragmentos moleculares dos marcadores comparadas com moléculas bioativas obteve uma pontuação baixa para todos os marcadores selecionados, o que demonstra baixa probabilidade de potencial biológico para as moléculas submetidas. Em seguida, a molécula da graveolina foi avaliada pelo programa pharmpaper, que utiliza a determinação por similaridade farmacofórica, o qual fornece imagens e pontua os possíveis encaixes entre os alvos biológicos encontrados e a molécula de interesse. Foi possível observar a possibilidade de encaixe entre a graveolina e a acetilcolinesterase, o que indica uma possível ação terapêutica da molécula da graveolina na doença de Alzheimer. **Conclusão:** Os resultados obtidos neste estudo ajudam a comprovar a hipótese de que os compostos bioativos da espécie vegetal *Ruta graveolens* podem ser terapêuticamente benéficos, abrindo perspectivas para o desenvolvimento de novos medicamentos de interesse ao SUS. No entanto, os métodos in silico não são suficientes para afirmar tal ação terapêutica, a qual poderia ser comprovada através de estudos mais aprofundados a cerca da molécula.

Palavras-chave: Plantas Medicinais. *Ruta Graveolens*. Graveolina