



ESPECTRO DE ATIVIDADE BIOLÓGICA IN SÍLICO DOS ÁCIDOS ORGÂNICOS PRESENTES EM ESPÉCIES VEGETAIS DO GÊNERO MYRCIARIA

AMANDA DE JESUS ROCHA; VINICIUS BARRETO DA SILVA
amandarocha.farmacia@gmail.com

Objetivo: Mapear o potencial biológico do ácido elágico, um componente de espécies vegetais do gênero Myrciaria, por meio do estudo da relação estrutura-atividade através do emprego da predição de atividade biológica por modelos farmacofóricos. **Método:** A estrutura química do ácido elágico foi modelada em representações 2D e 3D usando os programas ACD/ChemSketch Freeware Version e DS ViewerPro 6.0. Posteriormente, a estrutura do ácido elágico foi submetida ao programa Molinspiration, onde as propriedades químicas de seus fragmentos foram comparadas com as de fragmentos de moléculas bioativas que modulam importantes alvos de drogas. Em seguida, a estrutura do ácido elágico foi submetida ao programa de modelagem por farmacóforo PharmMapper, onde foi obtida uma lista de possíveis alvos biológicos, por meio da simulação de encaixes entre a estrutura química do marcador e os requerimentos farmacofóricos necessários para modulação em mais de 7.000 alvos biológicos implementados no programa. **Resultados:** O ácido elágico apresentou amplo espectro de atividade biológica quando avaliado por meio da triagem farmacofórica realizada através do programa PharmMapper. As características farmacofóricas do ácido elágico sugerem potencial atividade antihipertensiva, antitumoral, antimicrobiana e contra fibrose cística e osteoporose, uma vez que pode agir em alvos relacionados a tais condições patológicas. O alvo biológico formaldeído álcool desidrogenase classe 3 apresentou o modelo farmacofórico de maior encaixe em relação às características químicas espaciais do ácido elágico. **Conclusão:** Conclui-se que o ácido elágico é um bom ponto de partida para o desenvolvimento de novos medicamentos capazes de tratar doenças epidemiologicamente relevantes no país. Espera-se que a partir deste estudo novos investimentos sejam feitos para validar as atividades biológicas sugeridas para o marcador, sendo primordial a destinação de mais incentivos e apoio do governo e de empresas para o desenvolvimento tecnológico de medicamentos de interesse ao SUS.

Palavras-chave: Myrciaria. Alvos Biológicos. Ácido Elágico