



ESPECTRO DE ATIVIDADE BIOLÓGICA IN SILICO DOS POLIFENÓIS PRESENTES EM ESPÉCIES VEGETAIS DO GÊNERO MYRCIARIA FLÁVIA DE ALMEIDA MACHADO; VINICIUS BARRETO DA SILVA flaviamachadofarmacia@hotmail.com

Objetivo: Mapear o potencial biológico da quercetina, 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 da quercetina foi modelada em representações 2D e 3D usando os programas ACD/ChemSketch Freeware Version e DS ViewerPro 6.0. Posteriormente, a estrutura 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 da quercetina foi submetida ao programa 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 de mais de 7.000 alvos biológicos implementados no programa. **Resultados:** A quercetina apresenta amplo potencial para bioatividade, sobretudo porque apresenta características estruturais semelhantes aos inibidores enzimáticos, inibidores de quinase e ligantes de receptores nucleares. A triagem da bioatividade através de mapeamento farmacofórico revelou que a quercetina apresenta amplo espectro de atividade biológica, uma vez que detém diversos requisitos farmacofóricos que sugerem várias aplicações terapêuticas, sobretudo no tratamento da hipertensão, de alergias e de doenças parasitárias, virais e bacterianas. **Conclusão:** As espécies vegetais do gênero Myrciaria são ricas em componentes bioativos, com especial destaque para a quercetina, a qual apresenta estrutura química capaz de modular alvos biológicos diversos, o que pode conferir a esta substância um amplo espectro de atividade biológica. Nesse sentido, o investimento na quercetina como agente farmacológico parece promissor, em virtude da sua versatilidade farmacofórica identificada neste estudo.

Palavras-chave: Espécies Vegetais Do Gênero Myrciaria.. Quercetina.. Espectro De Atividade Biológica.