



BUSCA IN SILICO DE INIBIDORES DA LIPASE PANCREÁTICA A PARTIR DOS MARCADORES QUÍMICOS ENCONTRADOS NAS ESPÉCIES VEGETAIS DO GÊNERO MYRCIARIA.

MATHEUS GABRIEL DE OLIVEIRA; VINICIUS BARRETO DA SILVA
matheusgabriel06@hotmail.com

Objetivo: Identificar por meio de estratégias de modelagem molecular os marcadores químicos das espécies vegetais do gênero *Myrciaria* capazes de inibir a lipase pancreática. **Método:** Foram coletadas na literatura informações sobre os marcadores químicos de espécies vegetais do gênero *Myrciaria*, bem como de moléculas já identificadas como inibidores da lipase pancreática. As estruturas químicas dos marcadores e das moléculas bioativas foram modeladas em representações 2D e 3D usando os programas ACD/ChemSketch Freeware Version e Discovery Studio 6.0. As características químicas das moléculas bioativas foram comparadas com as dos marcadores químicos através da utilização dos modelos farmacofóricos obtidos com os parâmetros padrão do programa Pharmagist, através do mapeamento de características aromáticas, acceptor e/ou doador de ligação de hidrogênio, hidrofóbica, catiônica e aniônica. **Resultados:** As regiões hidrofóbicas e de aceptores de ligação de hidrogênio foram as que caracterizaram farmacoforicamente os inibidores de lipase pancreática. Já os marcadores possuem anéis aromáticos e aceptores de ligação de hidrogênio, o que favoreceu o seu encaixe nos modelos farmacofóricos propostos para as moléculas bioativas pertencentes ao grupo dos derivados benzênicos, seguido do grupo dos glicosídeos e polifenóis e em terceiro lugar pelo grupo dos derivados lactônicos. Rutin e casuarinin são marcadores que possuem características estruturais compatíveis com as encontradas em inibidores de lipase, pois se mostraram capazes de se encaixar concomitantemente nos três modelos farmacofóricos construídos para as moléculas bioativas. **Conclusão:** Algumas moléculas produzidas pelas espécies vegetais do gênero *Myrciaria* possuem características que atendem aos requisitos farmacofóricos exigidos para as diferentes classes de inibidores da lipase pancreática. Portanto, abrimos caminho para novas investigações para o emprego de marcadores do gênero *Myrciaria*, do qual a jabuticaba faz parte, no desenvolvimento de produtos tecnológicos voltados para o tratamento da obesidade mediante o uso de substâncias capazes de inibir a lipase pancreática.

Palavras-chave: Gênero *Myrciaria*. Modelagem Por Farmacóforo. Lipase Pancreática