

Avaliação *in silico* do potencial de similaridade a fármacos de flavonoides bioprospectados por plantas do nordeste

¹Liz Roberta Silva Lima – UECE – liz.lima@aluno.uece.br

²Daniela Ribeiro Alves – UECE – alves.danielaribeiro@gmail.com

³Vania Carla de Sousa – UECE – engenheiravania@gmail.com

⁴Lucas Soares Frota – UECE – lucassfrota@gmail.com

⁵Gabriela Marinho Gonçalves Franco – UECE – marinho.franco@aluno.uece.br

⁶Emmanuel Silva Marinho – UECE – emmanuel.marinho@uece.br

⁷Selene Maia de Moraes – UECE – selene.moraes@uece.br

PALAVRA-CHAVE: Compostos bioativos, Flavonóides, Fármacos naturais.

Introdução: Plantas da região Nordeste possuem grande potencial de produção de flavonoides devido às condições ambientais as quais estão inseridos. Os flavonoides são uma classe de compostos bioativos que possuem várias propriedades terapêuticas que tem ganhado bastante destaque, tais como: antivirais, antibacterianos, anti-inflamatórios, cardioprotetores, antidiabéticos, anticâncer, antienvelhecimentos e antioxidante. Neste contexto, a investigação de flavonoides como novos agentes terapêuticos potencialmente mais seguros e mais eficientes se faz necessária. **Objetivos:** Com este estudo objetivou-se avaliar flavonoides encontrados em plantas da região Nordeste, quanto às suas propriedades físico-químicas e potenciais bioatividades. As substâncias avaliadas foram: isoquercitrina, nicotiflorina, quercetina e rutina. **Métodos:** As estruturas foram obtidas no repositório PubChem, propriedades físico-químicas foram calculadas utilizando MarvinSketch e avaliadas segundo os critérios da “regra dos cinco” (RO5) de Lipinski. **Resultados:** Os resultados obtidos foram: isoquercitrina com massa molecular (MM) 464,379, doadores de hidrogênio(DH) 7, aceptores de hidrogênio(AH) 12 e log P -0,14; nicotiflorina com MM 594,522, DH 8, AH 15 e log P -0,57; quercetina com MM 302,238, DH 4, AH 7 e log P 2,16; por fim, rutina com MM 610,521, DH 10, AH 16 e log P -0,87. Compostos semelhantes a farmacos são definidos como aqueles que possuem propriedades

farmacodinâmicas e farmacocinéticas adequadas para se tornarem um medicamento, utilizando descritores moleculares como expressões numéricas para características químicas. Para tanto, a RO5 possui os seguintes descritores: >5 DH, >10 AH, massa molecular >500 daltons e log P >5. Valores para MM indicam o potencial molecular de ser absorvida pelas membranas celulares, Log P e DH e AH indicam suas possíveis interações intermoleculares, determinando, por exemplo a lipofilicidade ou o potencial antioxidante do composto. Seguindo estas interpretações, a quercetina apresentou os melhores resultados nas interações polares e hidrofílicas, exibindo potenciais efeitos quimioprotetores, bem como sua solubilidade em água foi compatível com a especificação encontrada na literatura, com bom potencial de biodisponibilidade de trânsito entre membranas celulares. A rutina apresentou menor potencial de biodisponibilidade permeabilidade e integridade para atravessar paredes biológicas. A nicotiflorina apresentou potencial permeável baixo, mas ainda superior a rutina, enquanto ambas exibiram potencial atividade antioxidante menor que entre as moléculas analisadas. A isoquercitrina tem potencial biodisponibilidade semelhante a quercetina. **Conclusão:** Todas as substâncias analisadas podem ser utilizadas em formulações farmacêuticas, devendo ser investigadas em novas avaliações mais especializadas. A partir dos resultados obtidos observa-se a importância do estudo de compostos bioativos no desenvolvimento de inovação de fármacos.