

## AVALIAÇÃO *IN SILICO* DE ATIVIDADE ANTIMALÁRICA DE PERÓXIDOS ORIUNDOS DE FONTES NATURAIS

Laís Cardoso Almeida<sup>1</sup>; Elisângela Santos<sup>1</sup>; Carine Sampaio Santana<sup>1</sup>; André Lacerda Braga Teles<sup>2</sup>; Franco Henrique Andrade Leite<sup>3</sup>

Artemisinina (QHS) é uma lactona sesquiterpênica com um grupamento endoperóxido, a qual vem sendo usada contra cepas de *Plasmodium falciparum* resistentes ao tratamento com cloroquina. O mecanismo de ação destes compostos está baseado na reação entre o grupamento peróxido com o grupo heme, levando a produção de radicais livres que podem matar o parasita. De forma semelhante à artemisinina, outros compostos naturais presentes na flora do semi-árido possuem o grupamento peróxido. No entanto, as respectivas atividades antimaláricas destes compostos não foram avaliadas. De posse deste conhecimento estudou-se a interação de 58 peróxidos com o grupo heme e comparou-se com os valores obtidos para a artemisinina. Dividiu-se estes peróxidos em dois conjuntos distintos. O primeiro conjunto, denominado de conjunto treino foi composto de 18 derivados da artemisinina com atividade biológica conhecida, descritos em literatura. O segundo conjunto, denominado de conjunto teste, foi composto por 40 peróxidos oriundos de fontes naturais. Obteve-se assim, uma correlação entre a energia relativa e a energia de ligação com a atividade biológica de 0,60 e 0,52 respectivamente. Os resultados da correlação mostraram que a metodologia está validada, dando suporte aos resultados encontrados nos estudos de docking com os peróxidos naturais. Dentre os compostos estudados, 06 peróxidos apresentaram energia de ligação e propriedades eletrônicas similares às apresentadas pela artemisinina. Estes resultados mostram que estes peróxidos podem apresentar atividade antimalárica, sendo compostos protótipos para o desenvolvimento de novos fármacos mais ativos do que a artemisinina, os quais podem ser obtidos a partir da flora brasileira introduzindo assim, uma nova esperança para o tratamento da malária que mata anualmente, duas vezes mais que a AIDS e muito mais que qualquer outra doença infecciosa.

**Palavras-chave:** Peróxidos; antimaláricos; artemisinina.

<sup>1</sup>Graduandos do Curso Farmácia, Bolsistas do Programa de Iniciação Científica - PROINC da Faculdade Maria Milza - FAMAM. laaiscardoso@gmail.com

<sup>2</sup>Mestrando e Docente da Faculdade Maria Milza – FAMAM

<sup>3</sup>Mestrando; Docente e Orientador do Trabalho Científico da Faculdade Maria Milza -FAMAM