

IDENTIFICAÇÃO DE POTENCIAIS FÁRMACOS ANTIMALÁRICOS OBTIDOS DE FONTES NATURAIS POR MODELAGEM MOLECULAR

Elisângela Santos¹; Carine Sampaio Santana¹; Laís Cardoso Almeida²; Franco Henrique Andrade Leite³

Artemisinina é uma lactona sesquiterpênica com um grupamento endoperóxido, a qual vem sendo usada contra cepas de *Plasmodium falciparum* resistentes ao tratamento com cloroquina. Os compostos endoperóxidos agem supostamente no grupo heme levando a redução da ligação peróxido e produção de radicais 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. O presente estudo propõe identificar potenciais fármacos antimaláricos obtidos de fontes naturais, realizando para este fim técnicas computacionais no intuito de estudar o mecanismo de ação entre os peróxidos e o grupo heme. De posse deste conhecimento será estudado a interação de 50 peróxidos naturais com o grupo heme fazendo a comparação com os valores obtidos para a artemisinina. Inicialmente, uma busca conformacional será realizada através do método MM3 para cada molécula. Os conformeros mais estáveis serão otimizados pelo método PM3(tm). A seguir, será realizado um *docking* entre os peróxidos e o grupo heme, seguido novamente de uma busca conformacional. Finalmente, o complexo será otimizado no intuito de obter os orbitais HOMO, LUMO e MEP através do método PM3(tm). Todos esses cálculos serão realizados através do pacote Titan. Espera-se, portanto, que este estudo teórico possa identificar protótipos com grupamento endoperoxido obtido de fontes naturais disponíveis na região do semi-árido, visto que atualmente, a malária vem matando muito mais que a AIDS, além do pressuposto da crescente resistência adquirida pelo parasita aos fármacos atuais.

Palavras-chave: Peróxidos; antimaláricos; artemisinina.

¹Aluna de Bacharelado em Farmácia, Faculdade Maria Milza, Bolsista PROINC do Projeto Identificação Racional de Novos Fármacos obtidos de fontes naturais por Modelagem Molecular. ellifarma@hotmail.com.

²Aluna do curso Bacharelado em Farmácia, Faculdade Maria Milza, Bolsista Voluntária do Projeto Identificação Racional de Novos Fármacos obtidos de fontes naturais por Modelagem Molecular.

³Orientador, Docente do curso de Ciências Farmacêuticas, Faculdade Maria Milza.