

# ESTUDO IN SILICO DE AGENTES NATURAIS CANDIDATOS A NOVOS FÁRMACOS

Beatriz Forte Quintela, Mariana Marques Carvalho Ponte, Ana Paula Saraiva de Oliveira,  
Maria Goretti de Vasconcelos Silva

A elaboração de um banco de dados de moléculas antitumorais de origem natural é uma etapa importante na busca de potenciais candidatos a agentes antitumorais com propriedades físico-químicas otimizadas. Com este objetivo, utilizando a base de dados SCOPUS, com as palavras-chave "natural" e "antitumoral", foram obtidos dados que permitiram a elaboração de um banco de dados com moléculas que apresentam atividade antitumoral isoladas nos últimos 20 anos de fontes naturais (plantas, organismos marinhos, fungos). As moléculas encontradas em artigos e reviews, foram tabeladas e submetidas a busca de dados em plataformas virtuais, como PubChem, SciFinder, Marvin, VCCLab e Molinspiration, acerca de suas propriedades químicas e físicas. Estes dados permitem identificar no banco de moléculas, os possíveis melhores fármacos, aplicando a regra dos cinco de Lipinski, como massa molecular, log P e ligações de hidrogênio receptoras e doadoras, além de outras propriedades como a presença de ligações livres que pode estar relacionada com o surgimento de efeitos colaterais em fármacos. Atualmente, 135 compostos foram tabelados e 59% deles obedecem a regra dos cinco de Lipinski. Destes, 21 estão presentes em plantas que ocorrem no Nordeste brasileiro. As propriedades ADME desses compostos foram determinadas por meio de plataformas de dados disponíveis on-line e as classes dos compostos identificados são principalmente alcaloides e compostos fenólicos. A determinação das propriedades ADME é um importante filtro no processo de triagem de compostos com potencial aplicação como fármaco, pois prediz parâmetros importantes para a eficiência de um composto como candidato a fármaco.

Palavras-chave: Produtos Naturais. In Silico. ADME. Antitumoral.