

## INVESTIGAÇÃO IN SILICO DE PROPRIEDADES DE COMPOSTOS SELENOINDÓLICOS

Gustavo Luiz Padilha<sup>1</sup>, Audren Monteiro Vieira<sup>1</sup>, Juliana M. F. Miolo Schneider<sup>1</sup>, Rodrigo Ligabue Braun<sup>1</sup>, Alessandra Nejar Bruno<sup>2\*</sup>  
\*Orientador(a)

<sup>1</sup>Universidade Federal de Ciências da Saúde de Porto Alegre (UFCSPA)

<sup>2</sup>Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Sul (IFRS) - *Campus* Porto Alegre. Porto Alegre, RS

O câncer engloba um grupo complexo de doenças caracterizadas por células anormais com uma proliferação descontrolada. O número de novos casos de câncer no Brasil tem crescido, entretanto, os tratamentos antineoplásicos induzem uma série de efeitos adversos e não eliminam a possibilidade de reincidência. Dessa forma, são incentivados estudos prospectivos para o desenvolvimento de novos fármacos e tratamentos para essa doença. Os núcleos indólicos funcionalizados estão presentes em diversos produtos naturais e compostos medicinais. Além disso, a incorporação do selênio em moléculas orgânicas implica em melhoria e/ou manifestação de bioatividade, tornando compostos selenoindólicos estruturas interessantes no desenvolvimento de compostos com potencial terapêutico. Neste contexto, cabe mencionar a importância dos estudos in silico, já que possibilitam a caracterização química de moléculas e previsões farmacocinéticas e farmacodinâmicas, possibilitando selecionar previamente moléculas com possíveis atividades de interesse, evitando o investimento em pesquisas com moléculas sem atividade. Dessa forma, o presente trabalho visou estudar in silico três moléculas selenoindólicas inéditas previamente sintetizadas e nomeadas para esse trabalho como Indol 1, Indol 2 e Indol 3. Foram utilizadas duas ferramentas disponíveis de forma online e gratuita: SwissADME que entre outras funções caracteriza quimicamente e avalia o quão druglike é um composto; Hitpick que prediz possíveis alvos para os compostos estudados. Como resultados foi obtido que as moléculas estudadas não apresentaram nenhuma violação às regras utilizadas pela ferramenta SwissADME para avaliar o drug-likeness. Além disso, todas as moléculas estudadas apresentaram como possível alvo a proteína protrombina (trombina inativa com importante papel no sistema hemostático) com 77% a 53% de precisão. Sabe-se que em diversos tumores há um aumento no risco de trombólise, e que o sistema hemostático também está relacionado com o processo de progressão tumoral, angiogênese e metástase. Esses resultados indicam que as moléculas estudadas apresentam um potencial promissor como novos fármacos no tratamento de tumores, entretanto ainda são necessários estudos in vitro e in vivo para que sejam confirmadas essas previsões.

Palavras-chave: In silico. Selenoindóis. Câncer.