

Estudo computacional do potencial inibitório de metabólitos da *Byrsonima japurensis* frente enzimas da *Leishmania* spp.

Aila Beatriz Vasconcelos Araújo¹, Tallita Marques Machado^{1*}, Fernanda Guilhon-Simplicio¹

¹ Laboratório de Fitoquímica e Semissíntese - FITOPHAR, Faculdade de Ciências Farmacêuticas, Universidade Federal do Amazonas

*Bolsista da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo vinculada ao projeto AmazonIA

Introdução: As leishmanioses são doenças tropicais negligenciadas causadas por protozoários do gênero *Leishmania* spp., representando um grave problema de saúde pública em regiões como a Amazônia, devido à ampla distribuição geográfica e alta morbimortalidade. Os tratamentos disponíveis apresentam limitações, como toxicidade e baixa eficácia, o que reforça a necessidade de descoberta de novas moléculas com potencial leishmanicida. Neste contexto, a espécie *Byrsonima japurensis*, conhecida popularmente como sara-tudo e nativa da Amazônia, apresenta metabólitos secundários de interesse farmacológico, destacando-se os flavonoides rutina e naringenina, conhecidos por suas propriedades bioativas. A análise *in silico* surge como uma ferramenta promissora para a triagem inicial desses compostos, permitindo a avaliação de suas interações com enzimas essenciais à sobrevivência do parasita, como arginase, tripanotiona redutase e lanosterol 14 α -desmetilase. **Objetivo:** Investigar, por meio de análise *in silico*, o potencial farmacológico de metabólitos presentes na *Byrsonima japurensis* frente enzimas-alvo da *Leishmania* spp. **Métodos:** Estudo *in silico*, descritivo e qualitativo. As estruturas tridimensionais das enzimas foram obtidas do Protein Data Bank (PDB), e os ligantes, rutina e naringenina, do PubChem. O preparo dos receptores e ligantes foi realizado no AutoDock Tools, seguido da execução dos ensaios de docking molecular via AutoDock Vina. A visualização e análise dos resultados foram conduzidas com os softwares Avogadro e Discovery Studio Visualizer, considerando os valores de energia livre de ligação (kcal/mol) e o padrão de interações moleculares. **Resultados:** A rutina apresentou maior afinidade de ligação com todas as enzimas: -10,6 kcal/mol (triptofano redutase), -6,4 (arginase) e -9,8 (lanosterol-desmetilase). A naringenina obteve -8,5, -6,5 e -9,3 kcal/mol, respectivamente. Ambas as moléculas formaram mais de duas ligações de hidrogênio com resíduos do sítio ativo, sugerindo estabilidade nos complexos. Os dados reforçam o potencial dessas substâncias como inibidores moleculares de alvos relevantes para a viabilidade do parasita. **Conclusão:** Os resultados evidenciam que a rutina e a naringenina, metabólitos majoritários da *Byrsonima japurensis*, apresentam potencial ação inibitória de enzimas essenciais à *Leishmania* spp.. Contudo, é necessário a avaliação *in vitro* e *in vivo* para comprovação de sua ação biológica.

Palavras-chaves: leishmaniose; flavonoides; plantas medicinais; simulação de acoplamento molecular.