



UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS XXX CONGRESSO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

Planejamento e síntese de moléculas *anti-Leishmania* derivadas do lapachol

Larissa Magno Monteiro – (Voluntário)
Fernanda Guilhon Simplício- UFAM

RESUMO

A leishmaniose é uma infecção causada por parasitas do gênero *Leishmania*. Sendo considerada uma doença negligenciada, apresenta terapia medicamentosa limitada, já que há uma série de complicações indesejáveis decorrentes do tratamento e os microrganismos mostram-se resistentes à alguns fármacos, evidenciando a necessidade do desenvolvimento de novos medicamentos no combate à leishmaniose. Visto que estudos recentes comprovaram a ação do lapachol e de seus derivados contra espécies causadoras da doença, esta molécula foi dada como excelente protótipo para novos medicamentos antiparasitários. Neste projeto, com base nas pesquisas de estrutura-atividade relatadas na literatura, 42 compostos foram planejados e submetidos ao *docking* molecular com os alvos enzimáticos Metionil-RNA_s sintetase e *N*-miristoiltransferase. Os compostos D15, D19, D20 e D33 apresentaram os resultados mais satisfatórios, sendo conduzida a predição *in silico* de suas propriedades farmacocinéticas e toxicológicas. Segundo os valores obtidos pelos *softwares* SwissADME®, PreADMET® e OSIRIS Property Explorer®, bem como sua performance na triagem virtual, D20 foi selecionado como o derivado mais promissor para as análises posteriores, onde o derivado será sintetizado e testado *in vitro* contra as cepas de *Leishmania sp.* e avaliado quanto a toxicidade à células humanas. Dessa forma, este trabalho visa contribuir no desenvolvimento de novos medicamentos anti-*Leishmania*, fornecendo novas moléculas com potencial antiparasitário que podem ser investigadas *in vivo* em estudos posteriores.

Palavras-chaves: Lapachol; Leishmaniose; *Docking* Molecular; Antiparasitários; Desenvolvimento de fármacos.