

## RESUMO - FISIOLOGIA E FARMACOLOGIA

### INVESTIGAÇÃO IN SILICO DA ALICINA DO ALHO (ALLIUM SATIVUM) COM ATIVIDADE CARDIOPROTETORA

*Ana Gabrielle Da Silva Mendes (ana.mendes@ufpi.edu.br)*

*Debora Kaline Sousa Oliveira (eborakalineso@hotmail.com)*

*Emanuela Vercezi Duarte (manuvercezi02@gmail.com)*

*Francisco Douglas Oliveira Matias (douglasmatias@ufpi.edu.br)*

*Maria Vitória Pereira De Sousa (mariavitoriap@ufdpar.edu.br)*

*Hélio Mateus Silva Nascimento (helio.mateus@ufma.br)*

INTRODUÇÃO: As doenças cardiovasculares (DCV) representam um dos maiores desafios

para a saúde pública atualmente, sendo responsáveis por uma proporção significativa das

mortes no Brasil. Segundo a Estatística Vascular - Brasil 2021, as DCV contribuem com

quase um terço de todos os óbitos, com uma incidência especialmente alta entre as

populações mais economicamente vulneráveis. O Allium sativum, conhecido como alho, tem

sido utilizado há séculos para fins medicinais, e suas propriedades benéficas são bem

reconhecidas, incluindo a redução do colesterol, a regulação da pressão arterial, a melhora da

aterosclerose e a atividade antitrombótica. OBJETIVO: O presente estudo teve como

objetivo realizar uma análise in silico das propriedades físico-químicas, farmacocinéticas e

toxicológicas do *Allium sativum*, de modo a evidenciar suas características terapêuticas.

METODOLOGIA: Para prever atividades biológicas, um método utilizado foi o servidor

SwissADME. Este serviço analisa as estruturas moleculares fornecidas na forma de SMILES

(Simplified Molecular Input Line Entry System) e fornece informações sobre os efeitos

farmacológicos, mecanismos de ação, efeitos tóxicos e adversos, interações com enzimas e

transportadores metabólicos, influência na expressão gênica, entre outras características

relevantes. Além disso, a análise de predição toxicológica foi realizada utilizando o

ADMETlab, sendo que esse processo envolveu a avaliação por similaridade para prever uma

variedade de toxicidades, incluindo toxicidade aguda, hepatotoxicidade, citotoxicidade,

carcinogenicidade, mutagenicidade e imunotoxicidade. Essas ferramentas oferecem uma

abordagem computacional para a avaliação de moléculas quanto à sua segurança e eficácia

potencial. RESULTADOS: O estudo concluiu que a alicina possui grande afinidade por água

(Solubilidade =  $2,25e+00$  mg/ml;  $1,39e$  mol/l), sendo assim hidrossolúvel. Além disso, a

alicina apresenta uma alta probabilidade de permear passivamente a barreira hematoencefálica, outrossim não se apresenta como substrato para glicoproteína P, indicando

não sofrer transporte ativo nessas barreiras. Pode-se observar também os alvos de ligação

TERT, CTSL, CTSB e TRPA1 que apresentam probabilidade de ligação de 0,99%. Alta

absorção intestinal e biodisponibilidade no organismo ( $F_{20\%} = 0,54$  e  $F_{30\%} = 0,54$ ).

Apresentando também uma moderada ligação com proteínas plasmáticas (52,04%) com

distribuição uniforme de volume (-0,53 L/kg). Apresentando um tempo de meia vida baixo (<

3 horas) com taxa de liberação de 0,73 mL/min/kg. A alicina mostrou-se também não

hepatotóxica e mutagênica, com LD50 de 809,58 mg/kg. CONCLUSÃO: Logo, os

resultados contribuem como fundamento de perspectiva da alicina como um futuro fármaco

cardioprotetor, bem como incentivar a sociedade acadêmica a desenvolver pesquisas

experimental e clínica, visando melhorar a saúde populacional.

Palavras-chave: allium sativum; cardioprotetor; bioinformática.