



XXXIII SIC SALÃO INICIAÇÃO CIENTÍFICA

Evento	Salão UFRGS 2021: SIC - XXXIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2021
Local	Virtual
Título	Inibidores de Aromatase Naturais in-Sílico : descoberta de potenciais medicamentos por computador - uma revisão
Autor	ALISSON MACIEL DREHER
Orientador	GRACE GOSMANN

Inibidores de Aromatase Naturais analisados *in-Sílico* : descoberta de potenciais medicamentos por computador- uma revisão

Álisson Maciel Dreher, Grace Gosmann

Faculdade de Farmácia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul

O câncer de mama é uma doença grave e de incidência mundial, tendo atingido mais de 66.000 mulheres brasileiras apenas em 2020. A utilização de fármacos chamados Inibidores de Aromatase (IA's) é aconselhada na maioria dos tratamentos, pois inibe o crescimento do tumor estrógeno-dependente. Os IA's que utilizamos hoje em dia como fármacos, apesar de serem eficazes e satisfatórios para o papel que desempenham, apresentam inúmeros efeitos colaterais como osteoporose, dores musculares e sintomas típicos de menopausa. Dessa forma, junto à evolução da medicina e o avanço da tecnologia, as pesquisas se direcionam para a busca de medicamentos que sejam mais eficazes, menos seletivos e com menos efeitos colaterais. Esse trabalho é uma revisão sobre inibidores de aromatase de origem natural e a utilização de ferramentas computacionais no processo de descoberta destes novos fármacos, tais como relação estrutura-atividade, simulações em docking e análises de dinâmica molecular. Realizando a busca na literatura, percebemos que estes recursos computacionais permitem analisar bancos de dados de milhares de moléculas provenientes de plantas do mundo inteiro e predizer o seu comportamento biológico, sem ser necessário analisá-las experimentalmente. Essa pesquisa nos permitiu concluir que a tecnologia computacional alinhada à síntese orgânica medicinal vem se mostrando uma ferramenta de alto potencial na busca de novos candidatos a fármacos. Desse modo, combinados com a alta diversidade estrutural dos compostos naturais, as buscas por moléculas inibidoras de aromatase se intensificam e a comunidade científica dá mais um passo na direção da descoberta de medicamentos mais eficazes contra o câncer de mama.