



Derivados triazólicos do eugenol como candidatos a inibidores das enzimas α -glucosidase e α -amilase: um estudo *in vitro* e *in silico* (Projeto PIBIC 2021-2022)

Maria Angélica Borba Vieira Ferreira¹, Amanda dos Santos Lima², Laura da Silva Cruz¹, Fernanda Rafaelly de Oliveira Pedreira², Priscila da Mota Braga¹, Luciana Azevedo², Róbson Ricardo Teixeira³, Graziela Domingues de Almeida Lima²

¹Universidade Federal de Alfenas, MG (UNIFAL), Laboratório de Análise Nutricional e Toxicológica *in vitro* e *in vivo* (LANTIN), Curso de Farmácia

²UNIFAL, LANTIN, Pós-Graduação em Biociências Aplicadas à Saúde

³Universidade Federal de Viçosa, MG
maria.vieira@sou.unifal-mg.edu.br

Introdução: O diabetes é um problema de saúde pública mundial, que poderá ser a 7ª causa de morte no mundo até 2030. O diabetes é um distúrbio metabólico crônico caracterizado pela concentração elevada de glicose no sangue que pode resultar em sérias patologias em diferentes órgãos, como pâncreas, rins e fígado. Embora existam fármacos disponíveis no Brasil que ajudam a controlar a hiperglicemia, estes não tiveram suas fases de determinação do efeito farmacológico e mecanismos de ação desenvolvidas no país, isso porque estas etapas são demoradas e dispendiosas. Nossa proposta além de reduzir estes déficits tecnológicos, ela traz uma atenção renovada sobre medicamentos inspirados em moléculas naturais e estimula a pesquisa por novos medicamentos para o tratamento do diabetes, utilizando para tal estratégias *in vitro* e *in silico*, como métodos que possibilitaram a redução dos custos e o tempo de desenvolvimento de um novo fármaco. Produtos naturais têm sido reconhecidos como fonte de diferentes compostos com atividade antidiabética. Dentre esses compostos, evidências científicas mostram que o eugenol possui atividade antidiabética promissora. **Objetivo:** Diante do exposto, a estratégia experimental será conduzida com o objetivo de estudar a atividade inibitória de derivados triazólicos do eugenol sobre enzimas envolvidas no metabolismo de carboidratos, a α -glucosidase e a α -amilase, utilizando para tal abordagens *in vitro* e *in silico*. **Materiais e métodos:** Os derivados do eugenol serão sintetizados de cedidos pelo Prof. Róbson Ricardo Teixeira do Laboratório de Biomimética e Química Supramolecular do Departamento de Química da Universidade Federal de Viçosa. A capacidade dos compostos em inibir a atividade das enzimas α -glucosidase e α -amilase será realizado utilizando kits enzimáticos. Após a seleção dos compostos mais promissores, os cálculos de *docking* molecular para o eugenol e seus derivados serão realizados para se determinar a ordem de afinidade relativa destes compostos frente às enzimas α -glucosidase e α -amilase. As estruturas tridimensionais das enzimas serão acessadas no Protein Data Bank. Os softwares AutoDock e o AutoDock Vina serão utilizados para os cálculos. Os sítios ativos dos alvos serão definidos como todos os átomos dentro de um raio de 7,0Å do ligante. Em seguida, o programa BINANA será utilizado para analisar as interações intermoleculares encontradas nos resultados de *docking*, usando configurações padrão, com exceção da distância da ligação de hidrogênio que será alterada para 3,5Å. **Resultados esperados:** Esperamos que a proposta resulte na (I) identificação e seleção de novas moléculas de partida para a síntese racional de antidiabéticos nacionais e que o (II) delineamento experimental proposto ajude a compreender as bases farmacológicas da ação desses compostos sobre enzimas envolvidas no controle do diabetes.

Palavras-chave: anti-diabético; anti-hiperglicêmico, compostos triazólicos, docking molecular, alfa-glicosidase e alfa-amilase.



Financiamento: Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) - Processo nº: 431330/2018-2.