



### MpoBi32-021

#### Caracterização de chalconas como atividade anticâncer

Carlos, G.M.L.(1); Melo, K.G.B.(1); Azevedo, T.O.(1); Freire, V.N.(2); Bezerra, E.M.(1); Costa, R.F.(1);  
(1) UFERSA; (2) UFC;

O câncer é caracterizado pelo crescimento desordenado de células que se aliam de maneira rápida originando a formação de tumores que, a princípio, invadem tecidos, mas também podem se encaminhar para órgãos vizinhos e/ou mais distantes do corpo humano, nesse sentido, algumas dessas células têm a habilidade de infiltrar tecidos adjacentes, se desprenderem de seu local de origem, ou tumor primário, e transitar pelos tecidos até formar tumores secundários ou metástases, estes situados em locais mais afastados. Assim, o câncer resulta da desordem genética e hereditária, mas também pode derivar de fatores externos, tais como, o estilo de vida, alimentação e outros. De acordo com Estimativa 2023 – incidência de Câncer no Brasil, principal instrumento de idealização e gestão oncológica do Brasil, em publicação no site do INCA, estima 704 mil casos novos de câncer no Brasil para cada ano do triênio 2023-2025, com destaque para as regiões Sul e Sudeste, que concentram cerca de 70% da incidência. Como medida para o combate, um dos mecanismos de tratamento para o câncer é o uso de fármacos. Em fases como a quimioterapia, seu uso auxilia na eliminação das células tumorais. Os compostos ativos, fármacos e produtos naturais são bastante estudados na área da química orgânica, por isso, existem diferentes métodos para realizar esses estudos, o uso de ferramentas computacionais, tais como, o docking molecular, juntamente com a modelagem molecular, que incide em um conjunto de ferramentas para construção, edição e visualização e análise e armazenamento de sistemas moleculares complexos, são os métodos utilizados nesta pesquisa. O docking é um método utilizado para realizar uma seleção primária ou ponto de partida, no estudo do potencial farmacêutico e/ou medicinal de um composto ou mesmo em famílias inteiras de compostos, tendo inclusive, o auxílio da utilização de bibliotecas e repositórios de estruturas de medicamentos. Dessa maneira, o uso de técnicas computacionais como o docking molecular está sendo essencial para o reaproveitamento e planejamento de fármacos. Sendo promissoras moléculas para o estudo de novos antineoplásticos, as propriedades biológicas das chalconas, tem como ponto forte a neutralização de espécies reativas de oxigênio/nitrogênio e atuando como mecanismos de defesa. Assim, por sua variedade estrutural essas substâncias apresentam diversidade de propriedades farmacológicas e, por esse motivo, despertam interesse demasiado em seu estudo, pesquisa e desenvolvimento.