

BIOCATÁLISE DE CURCUMINOIDES EM ÁGUA-DE-COCO CARREADOS POR B-CICLODEXTRINA: ANÁLISE IN SILICO E IN VIVO

Jorge Armando Jorge¹

Domingos Da Costa Chilanda António²

Eugénio Maurício³

Herminda Milton⁴

Aluisio Da Fonseca Marques⁵

RESUMO

Esta pesquisa desenvolve novos fármacos ansiolíticos a partir de curcuminoides extraídos da *Curcuma longa* L., oferecendo uma alternativa terapêutica inovadora e segura para contornar os severos efeitos colaterais, a tolerância e a dependência provocados pelos tratamentos convencionais com benzodiazepínicos e inibidores seletivos da recaptação de serotonina. A abordagem inovadora do trabalho estrutura-se em três eixos integrados: nanotecnologia associada à biotransformação verde, modelagem computacional *in silico* e ensaios biológicos *in vivo*. Inicialmente, utiliza-se o albúmen líquido da água-de-coco (*Cocos nucifera* L.) como um biocatalisador natural cujas enzimas, como peroxidase e polifenol oxidase, promovem alterações estruturais ecológicas nas moléculas de curcumina. Para superar a histórica limitação de baixa solubilidade e absorção desses compostos vegetais no organismo, os novos derivados são nanoencapsulados em β -ciclodextrina, garantindo maior estabilidade e excelente permeabilidade através da barreira hematoencefálica no Sistema Nervoso Central. Em seguida, a fase computacional emprega a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) para mapear conformações moleculares de menor energia e prever a reatividade química das substâncias, acompanhada por simulações de docking molecular que avaliam o acoplamento desses ligantes a alvos neurobiológicos estratégicos da ansiedade, com destaque para o canal iônico TRPA1 (Transient Receptor Potential Ankyrin 1), além do receptor GABA e dos sistemas serotoninérgico e adrenérgico. Por fim, a validação experimental ocorre através de testes comportamentais *in vivo* com o peixe zebrafish (*Danio rerio*), um organismo modelo consagrado por sua elevada similaridade genética, neuroquímica e fisiológica com o cérebro humano em respostas ao estresse. Desta forma, o trabalho correlaciona com precisão a eficácia predita pelas simulações teóricas à efetiva reversão do comportamento ansioso na prática. Meus agradecimentos vão a FUNCAP, pelo suporte, que tem sido fundamental para a execução das minhas atividades, impulsionando avanços bastante importantes na formação acadêmicas e na qualidade dos resultados adquiridos. Uma das grandes áreas de fomento desta pesquisa são nomeadamente: Ciências Exatas e de natureza, Ciências Biológicas e Ciências de Saúde.

Palavras-chave: Curcuminoides; Ansiolíticos; Biotransformação Verde; β -ciclodextrina.

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Discente, jorgejorge@aluno.unilab.edu.br¹

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Discente, silanda@aluno.unilab.edu.br²

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Discente, mauricioeugenio@aluno.unilab.edu.br³

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Discente, hermindamilton9@gmail.com⁴

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Docente, aluisiomf@unilab.edu.br⁵