



ESTUDO IN SILICO DE NAFTQUINONAS (BIFLORINA E BISBIFLORINA) COMO INIBIDORES DA ANEMIA: DOCKING MOLECULAR, DINÂMICA MOLECULAR, ADMET E ANÁLISE MM/GBSA

Joseano João André Rodrigues ¹

Pedro Paulino João ²

Maryan Angelica Seixas Ayrán ³

Pitra Pedro José Lopes ⁴

Aluisio Marques Da Fonseca ⁵

RESUMO

A anemia é uma das principais questões de saúde pública em todo o mundo, atingindo cerca de 25% da população mundial. Este estudo avaliou in silico o potencial de duas naftoquinonas, biflorina e bisbiflorina, isoladas de *Capraria biflora*, como moduladoras do receptor de adenosina A2A (A2AAR), proteína relacionada à anemia, tendo em vista a necessidade de novas terapêuticas. Para atingir esse objetivo, foram realizadas análises de docking molecular, simulações de dinâmica molecular, cálculos de energia livre (MM/GBSA) e predições de propriedades farmacocinéticas (ADMET). A metodologia incluiu a preparação estrutural dos ligantes utilizando o repositório PubChem, otimização conformacional e envoltória ao receptor A2A (PDB: 5IU7) por meio do AutoDock Vina, aplicada em uma simulação de 100 ns no software GROMACS. A estabilidade e a espessura dos complexos foram comprovadas por meio de RMSD, RMSF, formação de ligações de logística e cálculos de energia livre. Os resultados de docking mostraram uma alta camada, especialmente para a bisbiflorina (-11,0 kcal/mol), superando tanto o ligante nativo quanto a biflorina. As simulações de dinâmica molecular confirmaram a estabilidade conformacional, ao passo que os cálculos de MM/GBSA indicaram uma energia livre mais favorável para a bisbiflorina (-41,70 kcal/mol), seguida pela biflorina (-25,95 kcal/mol), em relação ao ligante nativo (-4,91 kcal/mol). As análises da ADMET indicaram compatibilidade com candidatos a fármacos, como boa permeabilidade e conformidade com a regra de Lipinski. Os resultados indicam que as naftoquinonas científicas, especialmente a bisbiflorina, têm um perfil promissor como protótipos para a criação de novos medicamentos contra a anemia, o que justifica a realização de estudos adicionais in vitro e in vivo para validação experimental.

Palavras-chave: Anemia; Docking molecular; Naftoquinonas.

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto das Ciências Exatas da Natureza, Discente, jjoseano58@gmail.com¹

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

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

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto das Ciências Exatas da Natureza, Discente, pitralopes1996@gmail.com⁴

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