



ESTUDO IN SILICO DE MOLÉCULAS BIOATIVAS PRESENTE NA ESPÉCIE AZADIRACHTA INDICA E SEU POTENCIAL FRENTE AO CÂNCER COLORRETAL (CCR)

AMANDA CAROLYNE COSTA COUTO DE SANTANA; MARCIA BARBOSA DA SILVA

Introdução: Considerada a terceira enfermidade maligna mais comum na população mundial, o Câncer Colorretal (CCR), tem seu desenvolvimento a partir de uma progressão tumoral ordenada com diversas alterações genéticas distintas e cumulativas. Um pólipó adenomatoso em suas fases iniciais manifesta-se de forma benigna até o surgimento do câncer. Estudos apontam efeitos promissores relacionados ao efeito antitumoral com extratos de *Azadirachta indica* - árvore da família *Meliaceae*, comumente utilizada para o tratamento de doenças cutâneas e várias outras infecções. **Objetivo:** Realizar uma busca *in silico* de compostos bioativos presentes na espécie *Azadirachta indica* com propriedades anticancerígenas. **Materiais e Métodos:** Os metabólitos ativos presentes na espécie *A. indica* serão identificados através da busca de artigos científicos em base de dados. As estruturas tridimensionais dos receptores de proteínas relacionados as vias de sinalização do CCR, serão recuperadas do Protein Data Bank, usando IDs de PDB e as estruturas dos ligantes serão obtidas através das plataformas ZINC15 e PUBchem. Receptores e ligantes serão preparados para docking molecular e a corrida será realizada pelo software AutoDockTools. Ao final serão analisadas as interações que acontecem entre o ligante e o receptor e em qual ponto ocorrem essas interações utilizando o software Discovery Studio. Com isso, ao obter os ligantes com melhores resultados, será construído um ligante único, utilizando o software MOE, para então, realizar, também, uma busca farmacofórica, com o fito de buscar novas indicações para fármacos. O resultado da interação oferecido pela técnica do molecular docking será analisada para simulações de dinâmica molecular, utilizando o software GROMACS. **Resultados Obtidos:** Até o presente momento foram selecionados 30 bioativos presentes na espécie *Azadirachta indica* e teremos com alvo a via de sinalização MTor. Espera-se, ao final da realização deste projeto, esclarecer os mecanismos de ação relacionados ao efeito antitumoral de compostos da espécie *Azadirachta indica*, através de ferramentas de bioinformática. **Conclusão:** São apontados efeitos promissores na literatura relacionados ao efeito antitumoral de bioativos presentes na espécie *Azadirachta indica*.

Palavras-chave: Carcinogênese colorretal, Neem, Antitumoral, Molecular docking, Bioinformática.