



A BIOINFORMÁTICA APLICADA A DESCOBERTA DE NOVOS FÁRMACOS ORIUNDOS DE VEGETAIS: UMA REVISÃO

RUANA CAROLINA CABRAL DA SILVA; MARIA CIDINARIA SILVA ALVES

Introdução: A bioinformática vem revolucionando a pesquisa farmacêutica através de ferramentas para a descoberta de novos fármacos a partir de fontes naturais, como plantas. O potencial terapêutico encontrado em compostos vegetais estimula a busca por abordagens inovadoras, integrando conhecimentos de diferentes áreas integradas a bioinformática para acelerar e otimizar a identificação de moléculas bioativas. **Objetivos:** Nesse cenário, objetivou-se nesse estudo descrever o papel essencial da bioinformática na descoberta de novos fármacos derivados de plantas, incluindo a predição de atividades biológicas e otimização de compostos bioativos. **Metodologia:** Foi realizada uma revisão da literatura utilizando bases de dados do *Google Scholar* através de descritores, em inglês e português, sendo eles: “bioinformática”; “novos fármacos”; e “plantas”, unidos através do conectivo “AND”. A partir da busca, foram selecionados artigos que abordam a utilização de ferramentas bioinformáticas na descoberta de fármacos a partir de fontes vegetais, considerando estudos publicados nos últimos 10 anos. **Resultados e Discussão:** Observou-se que a aplicação da bioinformática na análise de bancos de dados genômicos e proteômicos de espécies vegetais tem permitido a identificação de moléculas promissoras com potencial farmacêutico. O uso de ferramentas de modelagem molecular e simulação computacional tem possibilitado a previsão de interações molécula-alvo, facilitando a seleção de compostos candidatos para estudos experimentais. A revisão dos estudos revela que a bioinformática de fato vem permitindo a identificação de alvos terapêuticos e otimização de substâncias bioativas por meio de técnicas de engenharia molecular e design racional de fármacos. Além disso, a integração de informações de bancos de dados estruturais e funcionais tem impulsionado a descoberta de fármacos, acelerando a identificação de compostos com potencial terapêutico, como agentes antitumorais, antioxidantes e anti-inflamatórios, entre outros. **Considerações Finais:** A bioinformática tem se mostrado uma ferramenta valiosa e fundamental na descoberta de novos fármacos a partir de fontes vegetais. Sua capacidade de analisar grandes conjuntos de dados biológicos e modelar interações moleculares tem acelerado significativamente o processo de identificação de compostos promissores. Essa abordagem inovadora representa um passo fundamental no desenvolvimento de terapias mais eficazes e seguras, potencialmente beneficiando a medicina moderna com tratamentos derivados de fontes naturais.

Palavras-chave: Análise in silico, Novos medicamentos, Plantas, Potencial terapêutico, Compostos vegetais.