



MODELAGEM MOLECULAR APLICADA EM ESTUDOS DA FORMAÇÃO DE COMPLEXOS ENTRE O RESVERATROL E SEUS ANÁLOGOS E A COX-2

ALINE CORRÊA RIBEIRO; LOHAINE DOS ANJOS SOARES; GIULIANO REDER DE CARVALHO; SORAIA CHAFIA NABACK DE MOURA

Introdução: O resveratrol é um polifenol natural com uma ampla gama de benefícios biológicos, incluindo propriedades antioxidantes, anti-inflamatórias e cardioprotetoras. Age principalmente pela inibição da enzima ciclooxigenase 2 (COX-2), envolvida na produção de mediadores inflamatórios, como a prostaglandina E2 (PGE2). A modelagem molecular tem sido uma ferramenta importante para compreender como o resveratrol e seus análogos interagem com a COX-2, oferecendo um caminho promissor para o desenvolvimento de novos fármacos. **Objetivo:** O estudo visa analisar a formação de complexos entre o resveratrol, seus análogos e a COX-2, utilizando técnicas de modelagem molecular para avaliar as interações e a capacidade inibitória da COX-2, com foco na otimização de derivados mais eficazes. **Metodologia:** Foi realizada uma revisão narrativa da literatura, com análise crítica de artigos disponíveis nas plataformas Scielo e PubMed. A pesquisa envolveu estudos in silico e análises da interação entre resveratrol e COX-2, destacando modificações estruturais e seus efeitos sobre a atividade enzimática. **Resultados:** Numerosos estudos indicam que o resveratrol e seus análogos apresentam um potencial significativo como inibidores seletivos da COX-2, com a supressão da síntese de PGE2, o que pode ser relevante para o tratamento de doenças inflamatórias, além de efeito neuroprotetor associados à diminuição de mediadores inflamatórios. Modificações estruturais, como adição de grupos hidroxilados, metoxilados e/ou átomos de halogênio mostram promissores aumentos na atividade inibitória da COX-2. A modelagem molecular, por meio de técnicas como o docking, tem se mostrado uma ferramenta importante para a descoberta de novos medicamentos, por permite prever como compostos interagem com alvos biológicos e otimizar suas características, como a afinidade pelo alvo e a seletividade, contribuindo para o desenvolvimento de terapias mais eficientes. Até o momento, somente a classe de derivados hidroxilados são candidatos promissores para estudos in vivo. **Conclusão:** Os estudos indicam que o resveratrol e seus derivados hidroxilados têm potencial como inibidores seletivos da COX-2, relevantes para doenças inflamatórias. No entanto, sua baixa solubilidade e biodisponibilidade limitam a aplicação clínica. Modificações estruturais e modelagem molecular, como o docking, são essenciais para otimizar novos compostos terapêuticos.

Palavras-chave: **MODELAGEM MOLECULAR; DOCKING MOLECULAR; INIBIDORES DE CICLOOXIGENASE 2; RESVERATROL; RELAÇÃO ESTRUTURA-ATIVIDADE**