

## .KAEMPFEROL COMO AGENTE TERAPÊUTICO: AVALIAÇÃO IN SILICO DO POTENCIAL ANALGÉSICO E ANTI-INFLAMATÓRIO VIA COX-2 E RECEPTORES $\mu$ E $\kappa$ -OPIOIDES

Rian Talles Azevedo Castro<sup>2</sup>, José Calado Quilenda<sup>1</sup>, Taylline das Mercês Gonçalves<sup>1</sup>, Malú de Andrade Marques<sup>1</sup>, Wagner Rodrigues de Assis Soares<sup>3</sup>

1. Discente do Programa de Pós-graduação em enfermagem e saúde da UESB/BA
2. Discente do Curso de Farmácia da UESB/BA
3. Docente de graduação e da Programa de Pós-graduação em enfermagem e saúde UESB/BA

Apesar da eficácia, os opióides apresentam efeitos adversos e risco de dependência, limitando seu uso. Flavonoides naturais têm se destacado como alternativas seguras e promissoras no tratamento da dor e inflamação. O objetivo deste estudo foi avaliar o potencial do flavonóide presente em espécies medicinais do gênero *Annona*, com atividade antiinflamatória e analgésica, frente à proteínas COX-2 e receptores  $\mu$  e  $\kappa$ -opióides por meio de estudos *in silico*. Para isso, foi selecionado o Kaempferol, a partir de bancos de dados, convertidas em estruturas tridimensionais e submetidas a docking molecular utilizando os softwares AutoDockTools e Vina, MarvinSketch, Pymol e Discovery Studio Visualizer para análise ligante-receptor, sendo obtidas informações sobre as características ADMET. O Kaempferol apresentou afinidade molecular relevante com os receptores  $\mu$  (-7,48 kcal/mol) e  $\kappa$ -opioides (-4,47 kcal/mol), em comparação à morfina ( $\mu$ : -7,98 /  $\kappa$ : -5,86 kcal/mol) e à buprenorfina ( $\mu$ : -7,08 /  $\kappa$ : -7,50 kcal/mol). Para a enzima COX-2, o composto demonstrou energia de ligação de -8,60 kcal/mol, superior à observada para o diclofenaco (-6,88 kcal/mol), sugerindo potencial atividade anti-inflamatória. Conclui-se que o Kaempferol é um candidato promissor como agente anti-inflamatório e analgésico, reforçando a necessidade de validação por estudos *in vitro* e *in vivo*.

**Palavras-chaves:** Flavonóides; Inflamação; Analgesia.

## **Bibliografia consultada:**

1. FRONTIERS IN CHEMISTRY. **Applications of Virtual Screening in Bioprospecting: Facts, Shifts, and Perspectives to Explore the Chemo-Structural Diversity of Natural Products.** 2021. Disponível em: <https://www.frontiersin.org/journals/chemistry/articles/10.3389/fchem.2021.662688/full>.
2. PERIFERAKIS, A. et al. **Kaempferol: Antimicrobial Properties, Sources, Clinical, and Traditional Applications.** *International Journal of Molecular Sciences*, v. 23, n. 23, p. 15054, 2022.
3. PHYTOTHER RES. **Kaempferol exerts a neuroprotective effect to reduce neuropathic pain through TLR4/NF- $\kappa$ B signaling pathway.** 2022. Disponível em: <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/35234314/>.
4. Al-Khayri, J. M.; Sahana, G. R.; Nagella, P.; Joseph, B. V.; Alessa, F. M.; Al-Mssallem, M. Q. **Flavonoids as potential anti-inflammatory molecules: a review.** *Molecules*, Basel, v. 27, n. 9, p. 2901, 2022. DOI: 10.3390/molecules27092901. PMCID: PMC9100260. PMid: 35566252.