

AVALIAÇÃO *IN SILICO* DE ÁCIDOS GRAXOS BIOATIVOS DO ÓLEO DE BABAÇU (*Orbignya speciosa*) POR DOCKING MOLECULAR EM ALVO RELACIONADOS À INFLAMAÇÃO

Malú de Andrade Marques¹, Rian Talles Azevedo Castro², José Calado Quilenda¹, Taylline das Mercês Gonçalves¹, Wagner Rodrigues de Assis Soares³

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

Os ácidos graxos essenciais despertaram interesse, por apresentar potencial medicinal e ter menos efeitos colaterais que os fármacos anti-inflamatórios utilizados na terapêutica. O objetivo deste estudo foi avaliar o potencial dos ácidos graxos do babaçu (*Orbignya speciosa*), com atividade anti-inflamatória, frente à proteína IKK- β por meio de estudos *in silico*. A estrutura 3D da proteína IKK- β foi obtida no Protein Data Bank (4KIK) e foi realizado a docagem molecular no AutoDock Vina, entre a proteína e os compostos naturais/sintéticos (ácido láurico, aspirina, sulfasalazina, ATP e GSK). Foram avaliadas as propriedades físico-químicas, farmacocinéticas, farmacodinâmicas e toxicológicas. Os resultados indicaram que o ácido láurico (AL) seguiu a regra de Lipinski, possuindo uma absorção intestinal elevada (93%), sem a presença hepatotoxicidade. Sua energia de ligação (ΔG) com a IKK-B foi -6,4 kcal/mol, idêntica à aspirina (ácido acetilsalicílico), e com múltiplas ligações do tipo *van der Waals* e hidrogênio. O AL se ligou preferencialmente à região hidrofóbica sitio ativo da proteína, sendo os aminoácidos mais relevantes associados ao desenvolvimento de novos inibidores: Gly102, Cys99 e Val52. Conclui-se que o ácido láurico presente em óleos vegetais é um candidato promissor como agente anti-inflamatório, destacando-se a necessidade de validação por estudos *in vitro* e *in vivo*.

Palavras-chave: Produtos naturais; Ácido láurico; Docking molecular;

Referências

1. PIRES, D; BLUNDELL, T; ASCHER, D. pkCSM: Predicting Small-Molecule Pharmacokinetic and Toxicity Properties Using Graph-Based Signature. *Journal of Medicine Chemistry*, v. 58, p. 4066–4072, 2015. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1021/acs.jmedchem.5b00104>.
2. VARMA, S; SIVAPRAKASAM, T; ARUMUGAM, I; DILIP, N; RAGHURAMAN, M; PAVAN, K; RAFIQ, M; PARAMESH, R. *In vitro* anti-inflammatory and skin protective

properties of Virgin coconut oil. *Journal Tradit Complement Medicine*, v. 17, n. 9, p. 5-14, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jtcme.2017.06.012>.

3. LAOWANSIRI, M; SUWANCHOTE, S; WANNIGAMA, L; BADAVATH, V; HONGSING, P; EDWARDS, S; SURATANNON, N; CHATCHATEE, P; LERTPICHITKUL, P; RERKNIMITR, P; CHANTAWARANGUL, K; CHATPROEDPRAI, S; WANANUKUL, S; THAMMAHONG, A; PLONGLA, R; CHANACHAITHONG, P; CHAVASIRI, W; CHATSUWAN, T; CHIEWCHENGCHOL, D. Monolaurin inhibits antibiotic-resistant *Staphylococcus aureus* in patients with atopic dermatitis. *Scientific Reports*, v. 15, n. 1, p.23180, 2025. Disponível em: <https://doi.org/10.1038/s41598-025-05667-w>.

4. RADHAKRISHNAN, J; KENNEDY, B; NOFTALL, E; GIACOMANTONIO, C. Recent Advances in Phytochemical Based Topical Applications for the Management of Eczema: A Review. *International Journal of Molecular Sciences*, v. 25, n. 10, p. 5375, 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/ijms25105375>.