

## ANÁLISE IN SILICO DO POTENCIAL ANTI-INFLAMATÓRIO DE COMPOSTOS FLAVONÓIDES POR MEIO DE MODELAGEM MOLECULAR

José Calado Quilenda<sup>1</sup>, Daniel Eduardo Nascimento Neto<sup>2</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 do Programa de Pós-graduação em enfermagem e saúde UESB/BA

O uso de compostos naturais, como os flavonoides, tem despertado crescente interesse na farmacologia devido ao seu potencial terapêutico frente às limitações dos anti-inflamatórios convencionais. O objetivo deste estudo foi avaliar o potencial anti-inflamatório do Taxifolina (flavonoide) presente em nutracêuticos e produtos naturais, frente à proteína COX-2 (ciclooxigenase) por meio de estudos *in silico*. Foram utilizadas ferramentas de farmacologia e toxicologia computacionais para análise de propriedades físico-químicas, farmacocinéticas, farmacodinâmicas e predição de toxicidade. A estrutura da COX-2 foi obtida no RCSB PDB e os ligantes, incluindo Taxifolina e diclofenaco de sódio, foram preparados para simulações de docking molecular. Os sítios ativos foram identificados e as interações analisadas quanto à estabilidade e afinidade. A Taxifolina apresentou conformidade com a regra de Lipinski e boa absorção intestinal predita (69,3%). Sua energia livre de ligação com a COX-2 foi de -7,5 kcal/mol, indicando interação estável com resíduos-chave como Arg120 e Tyr355. O diclofenaco apresentou afinidade ligeiramente superior (-8,3 kcal/mol), confirmando sua ação como inibidor da COX-2. Quanto à toxicidade, a Taxifolina demonstrou perfil seguro, sem evidências de hepatotoxicidade. Os achados indicam que a Taxifolina é um candidato promissor como agente anti-inflamatório natural, recomendando-se estudos *in vivo* com zebrafish para validação farmacológica.

**Palavras-chave:** Flavonoides, COX-2, Inflamação.

## Referências

DAS, A; BAIDYA, R; CHAKRABORTY, T; SAMANTA, A.K; ROY, S. Pharmacological basis and new insights of taxifolin: A comprehensive review. *Biomedicine & Pharmacotherapy*, v. 142, p. 112004, 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.biopha.2021.112004>.

DASH, R; UDDIN, N ; HOSEN, Z; RAHIM Z. B; DINAR A.M ; KABIR M. S. H. Molecular docking analysis of known flavonoids as dual COX-2 inhibitors: implications for anti-inflammatory therapy. *Bioinformation*, v. 11, n. 12, p. 543–548, 2015. <https://doi.org/10.6026/97320630011543>.

LIU, Y; SHI, X; TIAN, Y; ZHAI, S; LIU, Y; XIONG, Z; CHU, S. An insight into novel therapeutic potentials of taxifolin. *Frontiers in Pharmacology*, v. 14, 2023. Disponível em: <https://doi.org/10.3389/fphar.2023.1173855>.