

ESTUDO *in silico* DAS PROPRIEDADES FARMACOCINÉTICAS DE *Inga laurina*

Cristian Kallahan Silva Chagas¹; Hanna Patrícia dos Santos Martins²; Maria Fani Dolabela³

Ciências da Saúde

RESUMO

O gênero *Inga* é importante para a região norte, principalmente devido seu valor culinário, devido seu fruto saboroso, e alguns estudos apontam para fortes atividades antioxidante e citoprotetora, dentre as espécies desse gênero, encontra-se a *Inga laurina*, diversas substância porém apesar de já terem sido isoladas, são poucos os estudos avaliando suas possíveis atividades *in silico*. O objetivo deste trabalho é realizar o estudo *in silico* das propriedades farmacocinéticas de substâncias já isoladas de *Inga laurina*. Foram testadas 11 substâncias já isoladas e identificadas anteriormente da *Inga laurina*: (Epi)galocatequina-3-*O*-(3",5"-*O*-Dimetil)-galato (01); 4'-metil-(Epi)galocatequina-3-*O*-(3",5"-*O*-Dimetil)-galato (02), Dodecanotato de 2-hidroxi-etila (03); Miricetina-3-*O*-Ramnosideo (04); galocatequina-(4 α -8)-4'-*O*-metilgalocatequina (05); epigalocatequina-(2 \rightarrow *O* \rightarrow 7, 4 \rightarrow 8)-4'-*O*-metilgalocatequina (06), Epigalocatequina-3-*O*-galoil-(2 \rightarrow *O* \rightarrow 7, 4 \rightarrow 8)-4'-*O*-metilgalocatequina (07), Galato de 2-(4'-galoil)-ramnopiranosil-4,6-diidroxifenila (08), Galato de 2-ramnopiranosil-4-galoil-6-hidroxifenila (09), Galato de metila (10) e a Miricetina Galoil-ramnosideo (11). Utilizando o software online PreADMET®, foram avaliados os seguintes parâmetros farmacocinéticos: permeabilidade em células MDCKCaco-2 (alta permeabilidade: >70 nm/sec, média: 4-70 nm/sec e baixa: <4 nm/sec); absorção intestinal humana (HIA) (bem absorvidos: 70 - 100%, moderadamente: 20-70% e mal: 0-20%; ligação à proteína plasmáticas (forte ligação: >90% e fraca ligação: <90%) e passagem pela barreira hematoencefálica (atravessa livremente: <2; moderadamente: 2.0-0.1; não atravessa: >0,1. Quanto a permeabilidade em células MDCK, apenas a substância 03 apresenta alta permeabilidade, a 10 possui média permeabilidade e todas as outras possuem baixa permeabilidade. Quanto a permeabilidade em células CACO2, todas as substâncias apresentaram média permeabilidade. Quanto a penetração na barreira hematoencefálica, apenas a substância 03 atravessa livremente, as substâncias 02 e 10 atravessam moderadamente e as outras não atravessam. A respeito da ligação a proteínas plasmáticas, as substâncias 04 e 10 são as únicas que não apresentam uma forte ligação, todas as outras ligam-se fortemente. Quanto a sua absorção intestinal em humanos, apenas a substância 03 é bem absorvido, 02, 06 e 10 são moderadamente absorvidos e todas as outras apresentam má absorção intestinal, essa má absorção intestinal é devido tais compostos apresentarem uma característica hidrofílica, além de que, devido sua alta ligação a proteínas plasmáticas, podem apresentar baixa atividade farmacológica e comprometer o metabolismo de outras substâncias. A análise *in silico* permite inferir que são necessárias modificações estruturais, para aumentar sua possível atividade farmacológica e absorção intestinal, devido a importância da espécie para a comunidade são necessários estudos *in vitro* e *in vivo*, para comprovação de tais características.

Palavras-chave: Farmacocinética. *Inga*. PREADMET.

¹ Discente petiano voluntário do grupo PET-Farmácia do Curso de Farmácia da Universidade Federal do Pará – criskallahan@gmail.com

² Mestranda do Programa de Pós-Graduação em Ciências Farmacêuticas da Universidade Federal do Pará – hannamartis77@gmail.com

³ Tutora do Grupo PET-Farmácia, Docente do Curso de Farmácia da Universidade Federal do Pará – fanidolabela20@gmail.com