

## USO DO DOCKING MOLECULAR NA DESCOBERTA DE NOVOS TRATAMENTOS PARA O CÂNCER

SANFORD, Ana Beatriz Aguiar<sup>1</sup>; ALMEIDA, Davi Benevides<sup>2</sup>; CAPELO, Melissa Figueiredo<sup>3</sup>; MOTA, Stéphanie Chrystine Balestro<sup>4</sup>; HONÓRIO JÚNIOR, José Eduardo Ribeiro<sup>5</sup>

### RESUMO

**Introdução:** O câncer é uma das principais causas de mortes mundiais. Com uma grande diversidade de tipos de tumores malignos, essa patologia se dá pela proliferação excessiva e desordenada de células que podem se espalhar pelo organismo do paciente. Os diferentes tipos de câncer possuem variadas origens, tais como mutações no genoma, exposição à radiação e maus hábitos alimentares. Muitas vezes, as medidas terapêuticas para essa doença não são eficazes em todos os tipos de tumores e apresentam efeitos colaterais não desejáveis. Desse modo, a docagem molecular surge como uma alternativa rápida e acessível na busca de novos tratamentos para o câncer. **Objetivo:** Verificar a eficácia do uso de docagem na pesquisa de novas medidas terapêuticas para o câncer. **Material e métodos:** Foi feita uma revisão literária por meio dos bancos de dados PubMed e Google Acadêmico, buscando artigos em inglês e português entre 2015 e 2020. **Resultados:** Foram encontrados 23 artigos, dos quais 6 foram inclusos neste trabalho. Um desses estudos de docking mostrou que a isoquercitrina, um composto presente na *Nandina domestica Thunb.*, possuía uma ligação estável com as proteínas-alvo estudadas para o câncer, o que sugere um possível uso das frutas dessa planta como tratamento para a doença, sendo, assim, necessária a confirmação desses resultados com testes *in vitro* e *in vivo*. Outro trabalho identificou, por meio da docagem molecular, o composto PI-083 como um potencial inibidor de proteassoma, devido a sua semelhança com o mecanismo de ação do Bortezomibe, um fármaco aprovado pela Food and Drug Administration no tratamento de câncer, indicando a sua possível utilização na terapia oncológica. **Conclusão:** Pode-se observar o uso da docagem como uma ferramenta confiável e de amplo acesso para a procura de novos tratamentos para o câncer.

**Palavras-chave:** câncer, docagem molecular, tratamento, tumor maligno.

<sup>1</sup> Centro Universitário Christus, Fortaleza, Ceará. [anabeatrizsanford@gmail.com](mailto:anabeatrizsanford@gmail.com).

<sup>2</sup> Centro Universitário Christus, Fortaleza, Ceará. [davi.benevidesps@gmail.com](mailto:davi.benevidesps@gmail.com).

<sup>3</sup> Centro Universitário Christus, Fortaleza, Ceará. [melissacapelo012@gmail.com](mailto:melissacapelo012@gmail.com).

<sup>4</sup> Centro Universitário Christus, Fortaleza, Ceará. [smotabiomedicina@gmail.com](mailto:smotabiomedicina@gmail.com).

<sup>5</sup> Centro Universitário Christus, Fortaleza, Ceará. [jose.ribeiro@unichristus.edu.br](mailto:jose.ribeiro@unichristus.edu.br).