

LIVRO DE RESUMOS



DÉCIMA PRIMEIRA SEMANA DA
GRADUAÇÃO E PÓS-GRADUAÇÃO DO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS - USP

2021



Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos

XI Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos

Livro de Resumos

São Carlos
2021

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 11

Coordenadores

Prof. Dr. Vanderlei Salvador Bagnato

Diretor do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Luiz Vitor de Souza Filho

Presidente da Comissão de Pós Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Luís Gustavo Marcassa

Presidente da Comissão de Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Comissão Organizadora

Arthur Deponte Zutião

Artur Barbedo

Beatriz Kimie de Souza Ito

Beatriz Souza Castro

Carolina Salgado do Nascimento

Edgard Macena Cabral

Fernando Camargo Soares

Gabriel dos Reis Trindade

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Gabriel Henrique Armando Jorge

Giovanna Costa Villefort

Inara Yasmin Donda Acosta

Humberto Ribeiro de Souza

João Hiroyuki de Melo Inagaki

Kelly Naomi Matsui

Leonardo da Cruz Rea

Letícia Cerqueira Vasconcelos

Natália Carvalho Santos

Nickolas Pietro Donato Cerioni

Vinícius Pereira Pinto

Normalização e revisão – SBI/IFSC

Ana Mara Marques da Cunha Prado

Maria Cristina Cavarette Dziabas

Maria Neusa de Aguiar Azevedo

Sabrina di Salvo Mastrantonio

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos
(11: 06 set. - 10 set. : 2021: São Carlos, SP.)
Livro de resumos da XI Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos/ Organizado por João H. Melo Inagaki [et al.].
São Carlos: IFSC, 2021.

412 p.

Texto em português.

1. Física. I. Inagaki, João H. de Melo, org. II. Título

ISBN 978-65-993449-3-0

CDD 530

PG95

Descoberta de novos derivados benzoimidazólicos como candidatos a compostos líderes para a MaláriaBARBOSA, C. S.¹; GUIDO, R. V. C.¹; AGUIAR, A. C. C.²; CRUZ, M. D.; DIAS, L. C.³

camilasbarbosa@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP²UNIFESP³Instituto de Química - Unicamp

A malária é uma doença que ainda atinge milhões de pessoas anualmente. Em 2019, a Organização Mundial da Saúde (OMS) reportou a ocorrência de 229 milhões de novos casos de malária, enquanto o número estimado de mortes foi de 409 mil em 87 países com malária endêmica. Na região das Américas, a OMS reportou a ocorrência de 889 mil casos (0.4% do total). Sendo que, Brasil, Colômbia e Venezuela representam 86% de todos os casos nessa região.⁽¹⁾ Apesar de todo o progresso alcançado com a diminuição no número de novos casos e no número de mortes nos últimos anos, a doença continua a ser um grave problema de saúde pública em muitos países. A presença dessa doença agrava ainda mais a situação de países pobres, uma vez que foi verificado menor crescimento econômico nos países com alta taxa de transmissão. Associado a isso, o controle, o tratamento e a prevenção impõe altos custos tanto para os indivíduos, quanto para os governos. Outro agravante para essa situação é o surgimento e a disseminação de cepas resistentes de parasitos e vetores ao tratamento e aos inseticidas disponíveis, respectivamente. Portanto, o impacto na economia associado ao surgimento e disseminação de resistência, refletem a importância na continuidade de investimentos e pesquisas, principalmente na busca de novos medicamentos contra a malária. O screening fenotípico de coleções de compostos é uma alternativa atrativa para a descoberta de moléculas com novos mecanismos de ação. A promissora atividade antiplasmodial de derivados benzoimidazólicos tem sido reportada na literatura.⁽²⁻³⁾ Este trabalho teve como objetivo determinar o perfil da atividade antiplasmodial de novos derivados benzoimidazólicos com substituintes nas posições 3, 5 e 6 do anel heterocíclico. No total, 20 compostos foram sintetizados e tiveram a atividade inibitória do crescimento de *Plasmodium falciparum* e citotoxicidade determinadas em ensaios padronizados. Os valores de potência variaram entre 0.095 e 18 μ M e citotoxicidade entre 6 e >58 μ M. Os índices de seletividade (IS, razão entre a citotoxicidade e atividade antiplasmodial variaram entre >1 e 116. Os dois inibidores mais potentes e seletivos foram selecionados como compostos representativos da série para a determinação do perfil da atividade antiplasmodial dessa classe de compostos. Para isso, será realizado: i. determinação da potência frente a um painel de cepas resistentes do *P. falciparum*; ii. avaliação do perfil combinatório de atividade com o artesunato (fármaco padrão para o tratamento da malária); e iii. investigação do mecanismo de ação através da inibição de polimerização da hemozoína e inibição da via de isoprenóides.

Palavras-chave: Benzoimidazóis. Malária. Perfil de atividade.**Referências:**

1 WORLD MALARIA REPORT 2020: 20 years of global progress and challenges. Geneva: World Health Organization; 2020. License: CC BY-NC-SA 3.0 IGO. 2 RAMACHANDRAM. S. *et al.* N-aryl-2-aminobenzoimidazoles: novel, efficacious, antimalarial lead compounds. **Journal Medicinal Chemis-**

try, v. 57, n. 15, p. 6642-6652, 2014. 3 HAMEED, P, S. *et al.* Aminobenzoimidazoles, a novel class of orally active antimalarial agents. **Journal Medicinal Chemistry**, v. 57, n. 13, p. 5702-5713, 2014.