

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

PG35

Descoberta de inibidores a partir de plantas do cerrado brasileiro como candidatos a compostos líderes para a malária

MOURA, I.¹; SOUZA, G.¹; SOUZA, L.²; AGUIAR, A. C. C.³; GUIDO, R. V. C.¹

igormrmoura@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

²Universidade Estadual de Goiás - UEG

³Universidade Federal de São Paulo - UNIFESP

A Malária é uma parasitose letal com prevalência mundial e apesar dos investimentos em busca de novas terapias medicamentosas, ainda é observado uma alta taxa de mortalidade. Na busca de novos candidatos a fármacos antimaláricos, a modulação da via glicolítica tem sido explorada como alvo para inibir o desenvolvimento do parasito e combater a infecção. A enzima enolase de *Plasmodium falciparum* (Pfen) é um alvo atrativo da via glicolítica do parasito que catalisa a conversão de 2-fostoglicerato (2PG) em fosfoenolpiruvato (PEP). Esta enzima também está associada a outras funções celulares importantes (funções “moonlighting”, funções não-glicolíticas), devido aos diferentes compartimentos biológicos nos quais é encontrada.(1) Nosso grupo determinou a estrutura cristalográfica 3D da Pfen juntamente com os seus complexos enzimáticos, cujas diferenças estruturais em comparação com a enzima homóloga humana permitirão a descoberta de novos inibidores seletivos.(2) Tendo em vista o sucesso dos fármacos antimaláricos provenientes de produtos naturais (PN) e que o Cerrado é uma fonte promissora da biodiversidade mundial, neste trabalho visamos a investigação de compostos bioativos deste importante bioma brasileiro frente ao parasita causador da malária. Ensaios iniciais de avaliação da atividade antiplasmodial de extratos de *Qualea grandiflora*, *Dalbergia miscolobium*, *Tabebuia ochracea*, *Pterodon pubescens* (folhas), *Geissospermum sericeum*, *Carapanauba* e *Maytenus guyanensis* Klotzsch mostraram que 9 deles apresentaram valores de inibição acima de 90% na concentração de 50 µg/mL, indicando que valores os valores de IC_{50} seriam abaixo de 10 µg/mL. Esses extratos foram selecionados para avaliação da inibição da Pfen. Os compostos isolados que apresentarem inibição significativa da enzima ($IC_{50}^{Pfen} < 1 \mu M$) e do crescimento do parasita ($IC_{50}^{Pf} < 1 \mu M$) com índices de seletividade promissores (SI > 10) serão selecionados para estudos in vivo para a comprovação da eficácia em modelo animal e confirmação da descoberta de novos candidatos a compostos líderes para a malária.

Palavras-chave: Malária. *Plasmodium falciparum*. Enolase

Referências:

- 1 VIVAS, L. *et al.* Plasmodium falciparum: stage specific effects of a selective inhibitor of lactate dehydrogenase. **Experimental Parasitology**, v. 111, n.2, p. 105–114, 2005.
- 2 MALUF, F. V. **Estudos estruturais e de química medicinal aplicados às enzimas da via glicolítica de protozoários: enolase de Plasmodium falciparum e gliceraldeído-3-fosfato desidrogenase de Trypanosoma cruzi.** 2015. 153p. Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2015.