

INVESTIGAÇÃO DA INTERAÇÃO DE ANTI-INFLAMATÓRIOS NÃO ESTEROIDAIIS (AINES) SOBRE A ENZIMA PAF AH *IN SILICO* E *IN VITRO* E A AVALIAÇÃO DO POTENCIAL COADJUVANTE PARA O TRATAMENTO DE TUMORES (APOIO SANTANDER-UNIP)

Alunos: Danillo Ravazani Silva Lima e Paloma Peixoto Borges

Orientadora: Profa. Dra. Caroline Ramos da Cruz

Curso: Biomedicina

Campus: Santos Rangel

A fosfolipase A2 associada a lipoproteínas (PAF-AH) regula processos inflamatórios, sendo fundamental na resposta imune e homeostase lipídica. Os anti-inflamatórios não esteroidais inibem enzimas ligadas à inflamação, dando suporte à imunidade antitumoral, já que reduzem fatores inflamatórios nesse microambiente. Este estudo visa aprofundar a compreensão sobre a modulação da enzima por determinados fármacos e explorar sua aplicação como coadjuvantes terapêuticos em tratamentos oncológicos. Na análise *in silico* foram utilizadas plataformas como GOLD, PyMOL, OBABEL e DataWarrior, com estruturas obtidas em bases como PubChem e RCSB PDB. As substâncias avaliadas foram dipirona monoidratada, dipirona, diclofenaco, diclofenaco potássico, nimesulida e ibuprofeno. A análise considerou as pontuações PLP, GOLDScore, ChemScore e ASP, que avaliam a afinidade ligante-proteína. Quanto à análise *in vitro*, realizou-se um ensaio de inibição da enzima com o PAF Acetylhydrolase Inhibitor Screening Assay Kit. Os fármacos testados (2 mg/mL em solução com 5% de DMSO) foram: diclofenaco resinato, diclofenaco potássico, diclofenaco sódico, dipirona monoidratada e ibuprofeno. No caso da análise *in silico*, a partir das pontuações obteve-se o seguinte ranking, do melhor para o pior composto: dipirona monoidratada (2,54), dipirona (2,32), diclofenaco (2,08), nimesulida (1,44), ibuprofeno (1,33) e diclofenaco potássico (1,31). Nos ensaios da análise *in vitro*, o diclofenaco potássico demonstrou o maior efeito inibitório sobre a enzima (64,3%). Em contraste, o diclofenaco resinato inibiu a

**XXVII Encontro de Iniciação Científica e
Iniciação em Desenvolvimento Tecnológico e Inovação**

enzima em 21%, enquanto a dipirona monoidratada apresentou apenas 13,3% de inibição. O ibuprofeno (6,6%) e o diclofenaco sódico (2,9%) tiveram os menores efeitos inibitórios. Este trabalho abordou estudos tanto *in silico* quanto *in vitro* para avaliar a interação dos fármacos com a enzima. Posteriormente será feito o estudo com células tumorais no intuito de identificar compostos com potencial ação coadjuvante no tratamento do câncer.