



E0652

### **HESPERIDINA COMO INIBIDOR DE INOSITOL-MONOFOSFATASES (IMPASE): ESTUDOS IN SILICO**

LILIAN GOULART SCHULTZ, Fabian G. V. Romero, Goran Neshich, José Gilberto Jardine e Profa. Dra. LJUBICA TASIC (Orientadora), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

A hesperidina é um bioflavonoide naturalmente encontrado em frutas cítricas, principalmente na laranja, que apresenta propriedades farmacêuticas interessantes, tais como ação antioxidante, anti-inflamatória e anticancerígena contra alguns tipos de carcinomas humanos, entre outras. Já é utilizada em um medicamento chamado **Daflon**. As inositol-monofosfatases (IMPases), apesar da IMPase 2 apresentar mais indícios, são fortemente associadas a esquizofrenia, febres convulsivas e ao transtorno bipolar. Essas doenças vem sendo tratadas com a litoterapia, que apesar de apresentar resultados satisfatórios possui série de efeitos colaterais. Esse trabalho tem por objetivo utilizar ferramentas de biologia computacional para verificar se a hesperidina pode ser um inibidor de IMPases. Foram testados sete ligantes diferentes: inositol monofosfato, *myo*-inositol, hesperidina, hesperitina e três conhecidos inibidores das IMPases frente as duas proteínas cujos códigos PDB são: 2czh e 1awb. Os dados *in silico* indicaram uma forte interação da hesperitina com ambas as enzimas como, também, uma maior afinidade da hesperitina quando comparada com os inibidores conhecidos e com o substrato (inositol-monofosfato) destas enzimas. Desta forma, hesperitina se mostrou um inibidor interessante.

HESPERIDINA - BIOFLAVONOIDE - INOSITOL MONOFOSFATASE