



MUDANÇAS, PERSPECTIVAS E TENDÊNCIAS SOCIOESPACIAIS:
15 ANOS DA FAMAM NO RECÔNCAVO DA BAHIA/BRASIL
8 A 10 DE NOVEMBRO DE 2018
FACULDADE MARIA MILZA



TOXICOLOGIA IN SILICO: UMA FERRAMENTA ESTRATÉGICA PARA OS ENSAIOS DE TOXICIDADE QUÍMICA

Aristides de Jesus Tinôco*
Kaique Figuerêdo Mercês de Oliveira*
Luana de Santana Correia*
Sara Silva Souza*
Paulo Roberto Ribeiro de Mesquita***

Com o avanço da indústria química através de ferramentas computacionais, como exemplo da modelagem molecular por homologia, novas substâncias são descobertas e lançadas como candidatas a novos fármacos. Entretanto, é necessário que se tenham dados que comprovem o quanto essas substâncias podem ser tóxicas ao ser humano e ao meio ambiente. Nesse contexto, os testes de toxicidade que até então eram realizados apenas in vitro, in vivo ou através de dados epidemiológicos, passam a ter como aliada uma nova ferramenta que são os testes in silico (toxicologia computacional), para que se possa acompanhar desenfreada descoberta de novas substâncias por parte dos setores de pesquisa e desenvolvimento das indústrias farmacêuticas. Os testes in silico estão sendo utilizados com frequência nos ensaios de toxicidade dessas novas moléculas candidatas a fármacos, sendo aplicado o método QSAR (*Quantitative Structure-activity Relationship*), e o método REA (Relação Estrutura-atividade), ambos os testes podem quantificar e comprovar os níveis de toxicidade de determinada substância. Com os resultados positivos que estes métodos apresentam, se tornou cada vez mais comum a aplicação dos mesmos na toxicologia contemporânea, trazendo como benefícios a racionalização do uso de animais, diminuem os custos e otimizam o tempo da pesquisa. O objetivo do estudo foi demonstrar os principais benefícios que os testes computacionais podem trazer para a análise toxicológica de novas substâncias evitando a utilização de animais e minimizando custos a pesquisa. O trabalho trata-se de uma revisão de literatura sistemática, onde foi realizado um levantamento bibliográfico a partir das seguintes bases de dados: *Scientific Electronic Library Online* (Scielo®), Centro Latino Americano e do Caribe de Informação das Ciências da Saúde (Lilacs®), Sistema Online de Busca e Análise de Literatura Médica (MEDLINE®), utilizando os descritores: toxicologia, toxicologia in silico, química computacional. Tendo como critérios de inclusão utilizados dos artigos: artigos escritos na língua portuguesa e em inglês, publicados entre os anos de 2013 a 2018 que abordem o tema pesquisado. Sendo que foram excluídos os artigos que não obedeceram aos critérios descritos. As pesquisas de modo geral demonstraram resultados positivos nas pesquisas que utilizaram técnicas in silico para demonstrar as atividades toxicológicas de novas substâncias químicas, diminuindo os altos investimentos e otimizando o tempo gasto em pesquisas. Além de se mostrar como uma ferramenta eficiente para a redução do número de testes em animais, que há anos vem sendo um grande desafio para ciência.

Palavras-chave: Toxicologia. Toxicologia in silico. Química computacional.

* Discentes do curso de Bacharelado em Farmácia da Faculdade Maria Milza - FAMAM.

Email: aristides.tinoco@hotmail.com, kaique.f.merces@live.com,

luanasantanacorreia2015@gmail.com, sarasilva66@hotmail.com

***Doutor em Química, Docente da Faculdade Maria Milza. prmesquita@gmail.com