



TRIAGEM VIRTUAL DE COMPOSTOS ORGÂNICOS CONTENDO SELÊNIO COM POTENCIAL ATIVIDADE ANTICÂNCER.

João Manoel de Sousa Silva¹, José Alixandre de Sousa Luís²

RESUMO

Os compostos à base de selênio têm potencial antitumoral. Nesse estudo foi usada uma análise de triagem virtual baseada na estrutura do ligante para identificar selenoglicolicamidas com potencial atividade antitumoral. Os compostos 3, 6, 7 e 8 foram selecionados para testes de citotoxicidade *in vitro* contra várias linhagens de células, pois se mostraram os mais promissores em nosso modelo. O composto 3 apresentou os melhores resultados de citotoxicidade contra uma linhagem de células de leucemia promielocítica (HL-60) e foi capaz de induzir a morte celular em uma frequência semelhante à observada para a doxorrubicina. O estudo de docking mostrou que o composto 3 tem boas energias de interação com os alvos caspase-3, 7 e 8, que são componentes da via apoptótica. Esses resultados sugerem que o selênio tem potencial farmacológico significativo para o direcionamento seletivo de células tumorais, induzindo eventos moleculares e celulares que culminam na morte das células tumorais.

Palavras-chave: Estudo *in silico*, Atividade Anticâncer, Química Medicinal.

¹Aluno do curso de Farmácia, Centro de Educação e Saúde, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: jhon.manuh@hotmail.com

²Doutor, Professor Associado, Unidade Acadêmica de Saúde, Centro de Educação e Saúde, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: jose.alixandre@professor.ufcg.edu.br

VIRTUAL SCREENING OF ORGANIC COMPOUNDS CONTAINING SELENIUM WITH POTENTIAL ANTICANCER ACTIVITY.

ABSTRACT

Selenium-based compounds have antitumor potential. In this study, a virtual screening analysis based on the ligand structure was used to identify selenoglycolicamides with potential antitumor activity. Compounds 3, 6, 7 and 8 were selected for *in vitro* cytotoxicity tests against several cell lines, as they were the most promising in our model. Compound 3 showed the best cytotoxicity results against a cell line of promyelocytic leukemia (HL-60) and was able to induce cell death at a frequency similar to that observed for doxorubicin. The docking study showed that compound 3 has good interaction energies with the caspase-3, 7 and 8 targets, which are components of the apoptotic pathway. These results suggest that selenium has significant pharmacological potential for the selective targeting of tumor cells, inducing molecular and cellular events that culminate in the death of tumor cells.

Keywords: *In silico* study, Anticancer activity, Medicinal Chemistry.