

Título: Abordagem in silico de tratamento promissor para a doença de Alzheimer

Palavras-chave:

Apigenina

Placa amiloide

Neuroproteção

Introdução: Doença de Alzheimer (DA) é uma doença neurodegenerativa progressiva e irreversível, caracterizada pelo acúmulo de peptídeos  $\beta$ -amiloide, pela fosforilação anormal da proteína tau e por neuroinflamação. A apigenina é um flavonoide natural encontrado em diversas plantas, como tomilho e frutas cítricas, e suas propriedades neuroprotetoras destacam seu potencial na melhora da saúde cognitiva e na prevenção de distúrbios relacionados ao envelhecimento, como a DA. Objetivo: Investigar a propriedade terapêutica da apigenina no tratamento da DA. Métodos: Neste estudo, utilizamos simulações computacionais de docking molecular. A proteína beta amiloide 42 foi buscada no banco de dados PDB com ID 7Q4B e a estrutura 3D da apigenina foi pesquisada no Pubchem com ID 5280443. Foram utilizados os softwares AutoDock Vina e Discovery Studio para realizar as interações e visualizá-las, respectivamente. Resultado: Foram realizadas 7 conformações diferentes interagindo as moléculas e a conformação mais estável foi a primeira conformação, com energia de afinidade de  $-8,36$  kcal/mol e eficiência de ligação de  $-0,42$ . Esses resultados confirmam que a apigenina possui alta afinidade com a proteína e é um favorável novo tratamento para a DA. No estudo de Zhao e colaboradores (2013), foi testado o efeito terapêutico da apigenina na função cognitiva em camundongos, tendo como resultado a melhora a memória e alivia a carga de  $\beta$ -amiloide, deixando esse peptídeo insolúvel, corroborando com o presente estudo e mostrando uma alternativa promissora para o tratamento de DA. Conclusão: Concluímos que a apigenina mostra potencial neuroprotetor e é indicado a necessidade de mais pesquisas para explorar e otimizar suas aplicações terapêuticas para a DA.