



PREDIÇÃO DE TOXICIDADE DA OCRATOXINA A UTILIZANDO PLATAFORMAS DE ANÁLISE *IN SILICO*

Emanoeli da Rosa, Discente de pós-graduação, Universidade Federal do Pampa,
Campus Uruguaiana;

Anelise Santos Soares, Discente de graduação, Universidade Federal do Pampa,
Campus Uruguaiana;

Lavínia da Veiga Pereira, Discente de graduação, Universidade Federal do Pampa,
Campus Uruguaiana;

Lucas Masao Cooper Inoe, Discente de graduação, Universidade Federal do
Pampa, Campus Uruguaiana;

Luís Flávio Souza de Oliveira, Docente, Universidade Federal do Pampa.

emanoelirosa.aluno@unipampa.edu.br

A Ocratoxina A (OTA) é uma micotoxina produzida por fungos dos gêneros *Aspergillus* e *Penicillium*. Considerada um contaminante alimentar, sua ocorrência se dá em cereais *in natura* ou processados, frutas, vinhos, café, carne suína, entre outros. Embora o consumo de alimentos contaminados por micotoxinas seja considerado um problema de saúde pública em diferentes países, a legislação brasileira não estabelece uma concentração segura para presença de OTA em produtos alimentícios. A OTA aparece relacionada a eventos patológicos agudos e crônicos, como insuficiência renal, podendo inclusive ocasionar a morte. Neste sentido, com o objetivo de avaliar os possíveis efeitos tóxicos desta micotoxina, foi realizado um *sceening* utilizando ferramentas que possibilitam explorar e investigar potencial toxicológico *in silico*. Foram empregadas cinco plataformas: *PubChem*; *Molinspiration*; *admetSAR*; *preADMET* e *XenoSite*, todas de acesso *on-line* gratuito. Inicialmente foi feita a busca do *smile* da molécula de OTA no *PubChem*, as demais plataformas citadas utilizam o *smile* para análise, simulação e predição, realizando múltiplas comparações estruturais no banco de dados de cada *software*. De acordo com as análises para os parâmetros de absorção, distribuição e excreção pelas plataformas *Molinspiration*, *admetSAR* e *preADMET*, a substância investigada apresenta as seguintes predições: alta absorção intestinal, baixa capacidade de permear a barreira cérebro/sangue, alto percentual de ligação a proteínas plasmáticas (PP), podendo levar a prejuízos no transporte hormonal ou de outros ligantes a PP. Além dessas, pela plataforma *preADMET*, demonstrou ser substrato para Glicoproteína P - envolvida na metabolização e excreção de xenobioticos, e exercer efeito inibitório sobre a ação de enzimas responsáveis por metabolizar determinados fármacos, efeito inibitório sobre hERG, responsável pela repolarização cardíaca. Adicionalmente, a plataforma *XenoSite* sugere que a molécula de OTA possui sítios de interação com DNA, GSH e proteínas de um modo geral. Esses resultados evidenciam o potencial tóxico da OTA, onde a capacidade de modular enzimas responsáveis pela metabolização e excreção de fármacos e xenobioticos pode estar associada a um dos possíveis mecanismos envolvidos durante processos patológicos desencadeados

pela OTA.

Agradecimentos: CNPq, UNIPAMPA.

Palavras-chave: Toxicologia; Micotoxinas; Contaminação de alimentos; Estudos computacionais preditivos.