

Avaliação das propriedades antitumorais de compostos Fenantrolina com Cobre (II) e Aminoácidos: estudos *in vitro* e *in silico*

Caroline Martins de Jesus¹, Wanderson Barros Rodrigues², Vinícius Diniz Ferreira³, Raquel Câmara de Oliveira³, João Gomes Oliveira Neto⁴, Guilherme Graziany Camelo de Carvalho³, Adenilson Oliveira dos Santos⁴, Aramys Silva dos Reis^{2,3}

¹ Programa de Pós-Graduação em Saúde e Tecnologia, Universidade Federal do Maranhão, Imperatriz, MA, Brasil.

² Laboratório de Fisiopatologia e Investigação Terapêutica, Programa de Pós-graduação em Saúde e Tecnologia, Universidade Federal do Maranhão, Imperatriz, MA, Brasil.

³ Centro de Ciências Sociais, Saúde e Tecnologia (CCSST), Universidade Federal do Maranhão, Imperatriz, MA, Brasil.

⁴ Laboratório de Crescimento de Cristais, Programa de Pós-Graduação em Ciências dos Materiais, Universidade Federal do Maranhão, Imperatriz, MA, Brasil.

Introdução: A utilização de compostos organometálicos tem se apresentado como uma importante alternativa na busca de potenciais agentes antitumorais, a exemplo dos complexos a base de cobre, que vêm sendo amplamente estudados com essa finalidade. Porém, tal atividade está intimamente associada aos seus ligantes, não havendo ainda estudos que utilizem esses complexos ligados a aminoácidos. Sendo assim, o presente trabalho tem como objetivo avaliar a atividade antitumoral *in vitro* de complexos organometálicos de Fenantrolina associado com cobre (II) e aminoácidos e prever suas propriedades farmacocinéticas a partir de estudos *in silico*. **Métodos:** Para isso, nós avaliamos a citotoxicidade dos complexos PGCu e PSCu nas linhagens tumorais de leucemia (HL-60), próstata (PC-3) e glioblastoma (SNB-19), e linhagem não tumoral de macrófagos murinos (RAW 264.7). Em seguida, realizamos a previsão dos parâmetros farmacocinéticos dos complexos de cobre (II). **Resultados:** Os complexos PGCu e PSCu apresentaram atividade citotóxica para todas as linhagens tumorais, com destaque para a linhagem de próstata, que se mostrou a mais sensível a ambos. Em adição, a predição farmacocinética indicou que o complexo PSCu apresentou uma boa absorção a nível de intestino delgado e também, um maior volume de distribuição quando comparado ao complexo PGCu. Além disso, os dois obtiveram pouca interação com os Citocromos P450 e com as glicoproteínas P, importantes para o processo de absorção e disponibilidade de fármacos. **Conclusão:** Mediante os ensaios realizados, é possível notar que ambos os complexos avaliados apresentam atividade antitumoral *in vitro*, com maior seletividade para o complexo PSCu.

Palavras-chave: Antitumoral, Organometálicos, Cobre, Aminoácidos.