

288

APLICAÇÃO DE MODELOS ESTATÍSTICOS NA PREDIÇÃO DA CAPACIDADE IMUNOADJUVANTE E HEMOLÍTICA DE DERIVADOS DO ÁCIDO QUINÓVICO DE UNCARIA TOMENTOSA (WILLD) DC.*Samuel Kaiser, Cabral Pavei, George Gonzalez Ortega (orient.) (UFRGS).*

As saponinas apresentam importantes atividades farmacológicas, dentre as quais se destacam as atividades imunoadjuvante e hemolítica. A espécie *Uncaria tomentosa* apresenta em sua composição química saponinas derivadas, principalmente, do ácido quinóvico, sendo que suas atividades imunoadjuvante e hemolítica não foram exploradas até o momento. Objetivo: Aplicar modelos de análise multivariada na predição dos potenciais imunoadjuvante e hemolítico dos derivados do ácido quinóvico relatados para *U. tomentosa*. Metodologia: No estabelecimento do modelo foram selecionadas 20 saponinas, com atividades hemolíticas e/ou imunoadjuvantes relatadas na literatura, estruturando-se uma matriz de dados. A análise da relação estrutura-atividade levou em conta os diferentes substituintes ligados à aglicona em C-3, C-4, C-16, C-17, C-21, C-22, C-28 e os valores relatados para as atividades biológicas. À matriz de dados foram aplicadas Análises de Agrupamentos e de Componentes Principais. Para a avaliação da potencialidade imunoadjuvante e hemolítica dos quinóvicos foram utilizados os padrões de substituição detectados como relevantes na matriz de dados. Resultados: A matriz de dados revelou que a atividade imunoadjuvante das saponinas pode estar relacionada à presença de uma metila em C-17, de uma hidroxila em C-21 e de dois açúcares ligados a aglicona. Já a atividade hemolítica pode estar relacionada à presença de uma hidroxila em C-16, de CH₂OH em C-17, de uma acetila em C-22 e de um grupamento acila em C-21. Constatou-se ainda, uma relação de oposição entre as atividades imunoadjuvante e hemolítica. A julgar pelos padrões estruturais dos quinóvicos de *U. tomentosa*, observa-se que estes tendem a apresentar predominantemente uma maior capacidade imunoadjuvante, se comparada à hemolítica. (CNPq).