

ATIVIDADE ANTIPROTOZOÁRIA *IN SILICO* DO SESQUITERPENO EPI-CUBENOL

Bernadete Santos ¹
Abrahão Alves de Oliveira Filho ²

INTRODUÇÃO

As protozooses são doenças causadas por protozoários parasitas, que são organismos unicelulares, eucariontes e heterotróficos, esses parasitas se hospedam dentro de outro organismo, vivendo a sua custa, causando doenças parasitárias que geram muitas vezes sérios problemas à saúde pública em escala mundial, assim emergindo a necessidade de novas alternativas terapêuticas para o combate desses microrganismos (QUINTANILLA; PINTO, 2014).

Uma vez que, as protozoonoses como: amebíase, leishmaniose, doença de Chagas e coccidiose, causadas respectivamente pelos protozoários: *Entamoeba histolytica*, *Leishmania sp*, *Trypanosoma cruzi* e *Eimeria sp*; possuem grande relevância mundial para a saúde pública (QUINTANILLA; PINTO, 2014). Bem como, outra doença parasitária, a coccidiose, causada por protozoários do gênero *Eimeria*, sendo considerada a doença mais importantes na avicultura industrial (ALLEN; FETTERER, 2002).

Algumas dessas enfermidades se não tratadas adequadamente, pode levar o paciente a óbito, como no caso da leishmaniose, as leishmanioses são uma das antroprozoonoses consideradas um grande problema de Saúde Pública e representam um complexo de doenças com importante espectro clínico e diversidade epidemiológica (BRASIL, 2013).

Dessa forma, torna-se urgente o desenvolvimento de novos fármacos antiparasitários para assegurar maior eficácia e segurança ao paciente, historicamente, os produtos naturais contribuem amplamente para o desenvolvimento da medicina moderna e ainda permanecem desempenhando um papel importante no descobrimento de fármacos (SEN; SAMANTA, 2014).

O terpeno Epi-cubenol é encontrado no óleo essencial que é extraído da *Rhaphiodon echinus* (PEREIRA, 2014). Espécie pertencente à família Lamiaceae, sendo este gênero monotípico. Espécie da Caatinga, cuja distribuição é registrada nos estados de Pernambuco, Bahia, Paraíba, Ceará e Minas Gerais (HARLEY et al., 2016).

Os terpenos apresentam componentes químicos derivados de organismos, associados diretamente ao metabolismo secundário, tendo como uma de suas características a presença de cheiro ou odor, como também ações benéficas na farmacologia (FELIPE; BICAS, 2017). Além disso, estudos farmacológicos confirmam que os terpenos demonstram diversas

¹ Graduando do Curso de Ciências Biológicas da Universidade Federal de Campina Grande- UFCG, bernadetes672@gmail.com

² Professor orientador: Doutor, Universidade Federal de Campina Grande – UFCG, abrahaofarm@gmail.com

atividades, por exemplo, anti-inflamatórias, antitumorais, antibacterianas, antifúngica e antioxidantes (YAO et al., 2016) (OLIVEIRA, 2016).

Com base nestas informações, o presente estudo teve como objetivo avaliar o potencial de atividade antiprotozoária *in silico* do terpeno epi-cubenol.

METODOLOGIA

Para a realização dos estudos *in silico*, todas as informações químicas (estrutura química da molécula, massa molecular, polaridade, CAS-number) do sesquiterpeno usado (epi-cubenol) foram obtidas no site <http://www.chemspider.com/>.

Para a análise das propriedades do epi-cubenol optou-se pelo software Previsão do Espectro de Atividade para Substâncias (PASS) online, que é um software gratuito projetado para avaliar o impacto do potencial biológico geral de uma molécula orgânica *in silico* sobre o organismo humano, onde fornece previsões simultâneas de muitos tipos de atividades biológicas com base na estrutura dos compostos orgânicos.

O espectro de atividade biológica de um composto químico é o conjunto de diferentes tipos de atividade biológica, que refletem os resultados de interação do composto com várias entidades biológicas. Pass online dá várias facetas da ação biológica de um composto, obtendo os índices Pa (probabilidade "de ser ativo") e Pi (probabilidade "de ser inativo") estimando a categorização de um composto potencial em ser pertencente à subclasse de compostos ativos ou inativos, respectivamente (SRINIVAS et al., 2014).

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Ao avaliar os dados, observa-se que o epi-cubenol obteve valores de potencial de ativação (Pa) maiores do que os valores de potencial de inativação (Pi) para todas as atividades antiprotozoais testadas. Com ênfase no efeito antiprotozoal para *Leishmania*, no qual o epi-cubenol apresentou um valor de Pa de 0,397 em relação a um de Pi de 0,050; no efeito antiprotozoal geral atingiu um valor de Pa de 0,195 comparado o Pi de 0,110; o efeito antiprotozoal (*Amoeba*) mostrou um valor de Pa de 0,250 e de Pi de 0,128; o efeito antiprotozoal (*Coccidia*) expressou um valor de Pa de 0,247 e de Pi de 0,113; o efeito antiprotozoal (*Trypanosoma*) indicou um valor de Pa de 0,277 e de Pi de 0,117.

Com base nos resultados, é possível presumir que estudos com espécies vegetais que possuem na sua composição o sesquiterpeno epi-cubenol possui grandes chances de se apresentarem como significativos agentes antiamebíco, antitrypanossoma, anticoccidia e antileishmania. O epi-cubenol (sesquiterpeno), objeto de estudo deste trabalho, evidencia-se como agente antiprotozoal, pelos efeitos atingidos com resultados satisfatórios.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Portanto, os dados apresentados confirmam que o epi-cubenol apresenta atividade antiprotozoária *in silico* sobre os parasitas: *Entamoeba histolytica*, *Trypanosoma cruzi*, *Eimeria sp* e *Leishmania sp*. Deste modo pode-se afirmar que o epi-cubenol poderá ser uma possível opção para o tratamento futuro de várias enfermidades causadas por protozoários, contudo, faz-se necessário a realização de novos estudos para comprovação dos dados obtidos nesta pesquisa.

Palavras-chave: Antiprotozoal, epi-cubenol, terpenos, protozoários.

REFERÊNCIAS

ALLEN P. C., FETTERER R. H. Recent advances in biology of Eimeria species and diagnosis and control of infection with these coccidian parasites of poultry. **Clinical Microbiology Reviews**, v. 15, n. 1, p. 58-65, 2002

BRASIL. MINISTÉRIO DA SAÚDE. **Doença de Chagas Aguda: Manual de Vigilância da leishmaniose Tegumentar Americana**, 2013. Disponível em: http://bvsms.saude.gov.br/bvs/publicações/manual_vigilancia_leishmaniose_tegumentar_america_2edicao.pdf. Acessado em: 25 de Out. de 2019.

FELIPE, L. O.; BICAS, J. L. Terpenos, aromas e a química dos compostos naturais. **Química Nova na Escola**, v. 39, n. 2, p. 120-130, 2017.

HARLEY, R. M. et al., **Lista de espécies da flora do Brasil**. Instituto: Jardim Botânico do Rio de Janeiro, 2016. Disponível em <HTTP://floradobrasil.jbrj.gov.br/jabot/floradobrasil/FB8295>. Acessado em 25 de out. de 2019.

OLIVEIRA, H. M. B. F. Avaliação das atividades antifúngica, antioxidante e citotóxica dos monoterpenos (r)-(+)-citronelal, (s)-(-)-citronelal, 7-hidroxicitronelal. 2016. 145 f. Tese (Doutorado em Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos) - **Universidade Federal da Paraíba**, João Pessoa, 2016.

PEREIRA, L. C. O. Pereira, L. C. O. (2014). **Caracterização química de óleos essenciais de quatro espécies da família Lamiaceae: Hyptis suaveolens (L.) Poit, Hyptispectinata (L.) Poit, Hyptismartiusii Benth. e Rhaphiodon echinus (Nees & Mart.) Schauer**. 2014. Trabalho de conclusão de curso (Graduação em Farmácia) –centro de ciências da saúde, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa.

QUINTANILLA, R. H. R.; PINTO, A. C. Constituintes Químicos e Propriedades Biológicas de Espécies do Gênero Serjania. **Revista Virtual de Química**, v. 6, n. 6, p. 1583-1606, 2014.

SEN, T.; SAMANTA, S. K., Medicinal plants, human health and biodiversity: a broad review. In: **Biotechnological Applications of Biodiversity**, v. 147, p. 59-110, 2014.

SRINIVAS, N. et al. In Vitro Cytotoxic Evaluation and Detoxification of Monocrotaline (Mct) Alkaloid: An In Silico Approach. **Int. Inv. J. Biochem. Bioinform.**, v.2, n.3, p.20-29, 2014.

YAO, J. L. et al. A Review on the Terpenes from Genus Vitex. **Molecules**, v. 21, n. 9, p. 1179, 2016.