

ATIVIDADE ANTINEOPLÁSICA DO EPICUBENOL: UM TESTE *IN SILICO*.

Maurício André Campos de Medeiros¹
Fernanda Matias Cariri Marques²
Maria Franczyherla Miguel da Silva Leite³
Mylena Medeiros Simões⁴
Abrahão Alves de Oliveira Filho⁵

INTRODUÇÃO

Atualmente no Brasil o número de problemas relacionados a neoplasias tem chamado a atenção no contexto da saúde pública no país (PANIS et al., 2018). As manifestações desses problemas no território nacional tem sido em muitos critérios esboçados e o crescimento de pessoas que desenvolvem problemas associados ao surgimento de neoplasias agressoras ao organismo humano, tanto em órgãos internos, como em partes externas do corpo é muito relevante, exigindo políticas que inibam tais situações (GUERRA; MOURA GALLO; MENDONÇA, 2005).

Segundo Oliveira e Evangelista-Coimbra (2014), em um estudo de revisão literária, diversos ensaios ou experiências são realizados para sanar em definitivo neoplasias agressoras, acrescentando uma alternativa que promova resultados positivos como a utilização de fitoterápicos, pois, inovações na fitoterapia, que utiliza plantas para extrair substâncias com essa finalidade, poderão produzir resultados promissores no combate a tumores ou neoplasias que atualmente não tem perspectivas de cura.

A família Lamiaceae possui um grande diversidade de espécies pelo mundo, apresenta em torno de 240 gêneros e um número de 7200 espécies, podendo ser encontrada em quase todo o planeta (HARLEY, 2012). *Rhaphiodon* Schauer está incluído na família Lamiaceae, representado pela espécie *Rhaphiodon echinus*, sendo um gênero monotípico (Flora do Brasil 2020).

No conhecimento popular, o chá da *R. echinus* é utilizado contra infecções na uretra, bexiga, ureter e rins. Possuindo também efeito sobre cólicas que antecedem o período menstrual da mulher (PIO et al., 2019). A espécie possui ação fungicida no controle de cepas de *Candida albicans* (FERREIRA et al., 2019).

¹ Graduando do Curso de Ciências Biológicas (Licenciatura) da Universidade Federal de Campina Grande - UFCG, mauricioandre64@gmail.com;

² Graduanda do Curso de Ciências Biológicas (Licenciatura) da Universidade Federal de Campina Grande - UFCG, ferandacariri20@gmail.com;

³ Graduanda do Curso de Ciências Biológicas (Licenciatura) da Universidade Federal de Campina Grande - UFCG, francyherllaleiite@gmail.com;

⁴ Graduanda do Curso de Ciências Biológicas (Licenciatura) da Universidade Federal de Campina Grande - UFCG, mylenamedeirossimoes@gmail.com;

⁵ Professor orientador: Prof. Dr. em Farmacologia do Curso de Ciências Biológicas da Universidade Federal de Campina Grande – UFCG, abrahao.farm@gmail.com;

O Epicubenol é um terpeno que está presente no óleo essencial extraído de *R. echinus*, sendo um dos componentes com percentual entre os terpenos destacados nos resultados da avaliação desse óleo essencial (PEREIRA, 2010). 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).

Diante disso, o presente trabalho teve como objetivo avaliar o potencial biológico *in silico* do Epicubenol, abordando atividades relacionadas no potencial antineoplásico, promovendo assim, uma futura opção terapêutica no combate a neoplasias.

METODOLOGIA (OU MATERIAIS E MÉTODOS)

Para a efetivação do estudo *in silico*, as informações químicas (CAS-number, massa molecular, polaridade, estrutura química da molécula) do terpeno selecionado (Epicubenol) foram obtidas pelo site <http://www.chemspider.com/>.

Para a análise das propriedades do Epicubenol, optou-se pelo software Previsão do Espectro de Atividade para Substâncias (PASS) online, sendo um software gratuito, projetado para avaliar o impacto do potencial biológico geral de uma molécula orgânica *in silico* sobre o organismo humano, apresentando 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 a coleção de desiguais tipos de atividade biológica, que transmitem os resultados de interação do composto com várias entidades biológicas. Pass online dispõe de várias facetas da ação biológica de um composto, logrando 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 analisar os dados, observa-se que o Epicubenol obteve valores de ativação (Pa) para os efeitos estudados bem mais elevados que os valores de inativação (Pi). Em especial pode-se destacar o efeito antineoplásico geral, no qual o Epicubenol apresentou um valor de Pa de 0,713 em relação a Pi de 0,024; em seguida o efeito antineoplásico (câncer de pulmão) apresentou um valor de Pa de 0,156 em relação a Pi de 0,095; o efeito antineoplásico (câncer de ovário) apresentou um valor de Pa de 0,165 em relação a Pi de 0,051; o efeito antineoplásico (câncer de rim) apresentou um valor de Pa de 0,228 em relação a Pi de 0,027.

Nesse contexto, muitos terpenos podem gerar grandes expectativas no controle de neoplasias apresentadas em células, abrangendo resultados positivos, por terem ação antineoplásica, apresentando, inclusive, efeitos positivos no combate a neoplasias agressoras nos pulmões como o levantamento bibliográfico feito por Ferreira (2014).

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Em suma, pode-se observar que o Epicubenol tem potencial e eficácia na atividade antineoplásica no estudo *in silico*. No entanto, ainda existem poucos estudos *in vitro* e *in vivo* com esse composto, revelando a necessidade de se intensificar mais pesquisas abordando está possível ferramenta farmacológica.

Palavras-chave: Fitoterapia, Estudo *in silico*, Epicubenol.

REFERÊNCIAS

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

FERREIRA, J. L. S. et al. Comparação da atividade antifúngica dos extratos etanólico e aquoso de *Rhaphiodon echinus* (Lamiaceae) contra cepas de *Candida albicans*. **Revista UNINGÁ**, Maringá, v. 56, n. 3, p. 1-8, jul./set. 2019.

FERREIRA, M. D. L. **Terpenos: potenciais agentes quimioterapêuticos obtidos de fontes naturais usados contra o câncer de pulmão**. 2014. 36 f. Trabalho de conclusão de curso (Graduação) - Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, 2014.

GUERRA, M. R.; MOURA GALLO, C. V.; MENDONÇA, G. A. S. Risco de câncer no Brasil: tendências e estudos epidemiológicos mais recentes. **Revista Brasileira de Cancerologia**, Rio de Janeiro, v. 51, n. 3, p. 227- 234, 2005.

HARLEY, R. M. Lista de verificação e chave de gêneros e espécies de Lamiaceae da Amazônia Brasileira. **Rodriguésia**, Rio de Janeiro, v. 63, n. 1, p. 129-144, março de 2012. Disponível em <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S2175-78602012000100010&lng=en&nrm=iso>. acesso em 09 de setembro de 2019.

OLIVEIRA, B. M.; EVANGELISTA-COIMBRA, C. C. B. *Euphorbia tirucalli*: No Tratamento Complementar do Câncer. **Revista UNINGÁ**, v.20, n.3, p.60-64, (out-dez), 2014.

PANIS, C. et al. Revisão crítica da mortalidade por câncer usando registros hospitalares e anos potenciais de vida perdidos. **einstein (São Paulo)**, São Paulo, v. 16. n. 1, abr. 2018.

PASTORE, J.F.B.; Mota, M.C.A. *Rhaphiodon in Flora do Brasil 2020 em construção*. Jardim Botânico do Rio de Janeiro. Disponível em: <<http://floradobrasil.jbrj.gov.br/reflora/floradobrasil/FB8295>>. Acesso em: 10 Set. 2019

PEREIRA, L. C. O. **Caracterização química de óleos essenciais de quatro espécies da família Lamiaceae: Hyptis suaveolens (L.) Poit, Hyptis pectinata (L.) Poit, Hyptis martiusii Benth. e Rhaphiodon echinus (Nees & Mart.) Schauer**. 2014. 54 f. Trabalho de conclusão de curso (Graduação em Farmácia) - Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, 2014.

PIO, I. D. S. L. et al. Conhecimento tradicional e uso de plantas medicinais pelos habitantes das ilhas do rio São Francisco, Brasil e análise preliminar de *Rhaphiodon echinus* (Lamiaceae). **Braz. J. Biol.**, São Carlos, v. 79, n. 1, p. 87-99, janeiro de 2019. Disponível em <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1519-69842019000100087&lng=en&nrm=iso>. acesso em 10 de setembro de 2019.

SRINIVAS, N.; SANDEEP, K. S.; ANUSHA, Y.; DEVENDRA, B. N. 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.