

AVALIAÇÃO DO POTENCIAL FARMACOLÓGICO DE COMPONENTES QUÍMICOS PRESENTES NAS FOLHAS *ALCHEMILLA VULGARIS*

Congresso Online Nacional de Química, 3ª edição, de 29/03/2021 a 01/04/2021
ISBN dos Anais: 978-65-86861-93-8

COSTA; Jhone Robson da Silva¹, VALE; Tassia Lopes do², SALES; Naylene Carvalho³

RESUMO

Introdução: *Alchemilla vulgaris* (manto de senhora) pertencente à família Rosaceae, uma planta bastante usada na medicina popular devido as suas propriedades biológicas tais como adstringente, antidiarreico, anti-inflamatório, antisséptico, anticâncer, cicatrizante e antimicrobiana, destacando-se como potencial para novos fármacos. **Objetivo:** avaliar in silico a ação anti-inflamatória, anticâncer, antiartrítica e antifúngica, assim como a ação farmacocinética e toxicológica de substâncias presentes nas folhas de *A. vulgaris*. **Materiais e métodos:** Foi realizado um levantamento bibliográfico de estudos realizados com *A. vulgaris* no período de 2010 a 2020. Os constituintes químicos majoritários e com maior frequência nas cromatografias foram selecionados para avaliação. Em seguida essas moléculas tiveram suas estruturas químicas desenhadas no software Molinspiration Cheminformatics®, e os seus efeitos biológicos determinados no PASS Online predicts® e a farmacocinética e toxicidade no preADMET (versão 2.0, Copyright). **Resultados:** A partir do levantamento bibliográficos, 6 moléculas presentes nas folhas de *A. vulgaris* foram selecionadas, onde as moléculas levoglucosenona, 3-hidroxi espirost-8-en-11-ona, Etil 9,12,15-octadecatrienote apresentaram predição a atividade anti-inflamatória, sendo que as duas primeiras também apresentaram predição a atividade antineoplásica. Somente a 3-hidroxi espirost-8-en-11-ona apresentou ação antifúngica e constatou-se que para atividade antiartrítica somente a levoglucosenona apresentou essa potencialidade. No que se refere a farmacocinética, todas as moléculas possuem bom perfil de absorção oral, capacidade de atravessar a barreira hematoencefálica e se ligam de maneira muito eficiente a proteínas plasmáticas. Além disso, todas as moléculas podem inibir a glicoproteína P (pg P) e inibir as enzimas citocromo P450, CYP3A4 e CYP2C9, com exceção do 2,7-Difenil-1,6 dioxopiridazino [4,5: 2,3] pirrolo. Já o Etanol, 2-9-octadeceniloxi, octadecanal-2-bromo, Etil 9,12,15-octadecatrienote inibiram a enzima CYP2C19 e somente a levoglucosenona inibiu a CYP2D6. Em consoante a isso, todas as moléculas apresentaram predição a carcinogenicidade, assim como a levoglucosenona, 2,7-Difenil-1,6 dioxopiridazino [4,5: 2,3] pirrolo e Octadecanal-2-bromo predição a mutagenicidade. **Conclusão:** As substâncias presentes nas folhas da *A. vulgaris* apresentam um grande potencial farmacológico. Contudo, demonstraram uma certa toxicidade, sendo necessários mais estudos para avaliar essa característica e desenvolver meios para contorná-la.

PALAVRAS-CHAVE: atividade farmacológica, toxicidade, farmacocinética

¹ Universidade Federal do Maranhão, jhonecosta2020@gmail.com

² Universidade Federal do Maranhão, tassiadovale@live.com

³ Universidade Federal do Maranhão, naylenecarvalho@yahoo.com.br