

ESTUDO *IN SILICO* DA TOXICIDADE DE METABOLITOS ISOLADOS DE *CRESCENTIA CUJETE* LINNAEUS

Wálíce Rans da Silva Padilha¹; Anderson Albuquerque de Souza²; Anísia Sofia Mota Barros²;
Luan Victor Resque Ramos²; Maria Fani Dolabela³

Ciências da Saúde

RESUMO

A *Crescentia kujete* (Bignoniaceae) é popularmente conhecida como cabaceira, frequentemente utilizada na medicina popular como: antiofídico, anti-hipertensivo, hipoglicemiante, no tratamento de infecções urinárias, anemias e abortivo. Na espécie foram isolados mais de 60 metabólitos de diversas classes, incluindo 15 glicosídeos iridoídeos, 4 derivados de feniletanóides, 15 flavonóides, 9 n-alquilglicosídeos, 23 derivados do ácido fenólico, entre outros. Os estudos *in silico*, a respeito da atividade toxicológica desses compostos são inexistentes, dando pioneirismo e importância a esta pesquisa. O objetivo deste trabalho é realizar a predição toxicológica de compostos isolados de *C. kujete*. Para tanto, foi utilizado o software PASS online (Predição de Espectros de Atividade para Substâncias) e o programa GUSAR para a realização da predição de toxicidade, em valores referentes à DL50 (Dose Letal de 50%) testados em ratos. O recurso digital se utiliza de dois parâmetros: “Pa”, sendo a probabilidade que a substância possui para desempenhar determinada atividade, e, “Pi”, a chance de não desempenhar a mesma. Nesta pesquisa foram analisados apenas os resultados toxicológicos com “Pa” maior que 7. Para o estudo, foram selecionados 11 metabólitos presentes em diferentes partes do vegetal: 5 glicosídeos iridoídeos, 4 glicosídeos flavonoides e 2 derivados de feniletanoides. A Luteonina-7-O-glucosídeo e a Naringina apresentaram consideráveis níveis de neurotoxicidade, nefrotoxicidade, hematotoxicidade e embriotoxicidade (Pa>7). O Acteosídeo também apresentou resultado positivo para embriotoxicidade, assim, atribuindo convergência com o que é descrito no uso popular, relacionado à propriedade abortiva. Além do mais, tais evidências apontam para eventuais riscos de anemia, leucemia, distúrbios renais, bem como para o envenenamento do Sistema Nervoso Central (SNC), ressaltando a importância de estudos mais aprofundados. Concomitantemente, acrescenta-se que apenas a Naringina possui característica citotóxica. Em contrapartida, nenhum dos 5 iridoídeos apresentaram quaisquer dos 9 parâmetros (Pa<7), evidenciando baixo grau de toxicidade quando comparados aos demais compostos. Igualmente, dentre todas as substâncias, nenhuma apresentou índices significativos de hepatotoxicidade, carcinogenicidade, mutagenicidade e imunogenicidade (Pa<7). Em suma, o presente estudo evidenciou atividades tóxicas significativas para todos os 4 flavonoides, o que inclui a luteonina, naringina, pinocembrina e erioctydiol, sendo que apenas um composto da classe dos feniletanoides apresentou toxicidade, sendo este, o acteosídeo. Vale ressaltar que, a alubina, o catalpol, o catalpolsídeo, o ajugol e o picrosídeo (irideos) não apresentaram níveis significativos de toxicidade, bem como a β-ionona (feniletanoide). No entanto, tais resultados demandam maiores estudos *in vitro* e/ou *in vivo* que busquem elucidar tais achados, no que diz respeito à toxicidade.

¹Discente PETiano(a) do Grupo PET Farmácia do Curso Farmácia da Universidade Federal do Pará (UFPA) – walicehansmorales@gmail.com.

²Discentes PETianos(as) do Grupo PET Farmácia do Curso Farmácia da Universidade Federal do Pará (UFPA)

³Tutor(a) do Grupo PET Farmácia, Docente do Curso de Farmácia da Universidade Federal do Pará – fanidolabela20@gmail.com

Palavras-chave: Bignoniaceae. Toxicologia. Predição.