

ESTUDO IN SILICO DA ATIVIDADE ANTINEOPLÁSICA DO LAPACHOL

XXXVIII Encontro de Iniciação Científica

Mara Thays Aguiar Carneiro, Igor Lima Soares, Tiago Araújo de Freitas, Marina Arruda de Castro, Mary Anne Medeiros Bandeira

Introdução: *Tabebuia avellanedae* ("Ipê-Roxo", "Pau D'arco") é uma espécie vegetal pertencente a Relação Estadual de Plantas Medicinais do Ceará sendo utilizada na medicina tradicional como antiinflamatória, antibiótica e antineoplásica. Pesquisas evidenciam que o ipê-roxo possui efeito pronunciado sobre o câncer, atribuído em grande parte a uma substância denominada lapachol, quimicamente identificada como uma naftoquinona. **Objetivo:** Avaliar in silico as atividades farmacológicas, efeitos tóxicos e colaterais do lapachol. **Metodologia:** Para a realização do estudo in silico, as informações químicas (estrutura, massa molecular, polaridade, CAS-number) do lapachol foram obtidas no site <http://www.chemspider.com>. Utilizou-se como ferramenta o software PASS Online, o qual é planejado para medir o potencial biológico de uma molécula orgânica in silico no organismo humano. O programa fornece predições concomitantes de vários tipos de atividades biológicas a partir da estrutura dos compostos inseridos no sistema, indicando os aspectos da ação biológica, através dos índices Pa (probabilidade de ser ativo) e Pi (probabilidade de ser inativo). **Resultados:** O estudo revelou o potencial antineoplásico do lapachol, o qual mostrou-se, de acordo com o software, ser um importante agente anticancerígeno em vários tipos de câncer, como os de mama, pulmão, de próstata e câncer cervical. O software revelou como possíveis efeitos tóxicos: hepatotoxicidade, nefrotoxicidade e hematotoxicidade e como efeitos colaterais foram destacados: tremores, delírios e descoloração na urina. **Conclusão:** Foi observado que a naftoquinona tem grande potencial e eficácia na terapia antineoplásica no estudo in silico, mas apresenta efeitos prejudiciais importantes. O uso do elixir de pau'darco em fitoterapia é uma importante alternativa ao uso do lapachol isolado, pois o fitoterápico possui um fitocomplexo de constituintes ativos que preservam a atividade anticancerígena e minimizam uma possível toxicidade.

Palavras-chave: Fitoterapia. *Tabebuia avellanedae*. Antineoplásico. Lapachol.