

POTENCIAL TERAPÊUTICO DE PLANTAS DO BIOMA BRASILEIRO E DO SEMIÁRIDO NORDESTINO PARA A SAÚDE BUCAL: APLICAÇÃO E EFETIVIDADE
POTENCIAL ANTI-INFLAMATÓRIO PARA AFECÇÕES ORAIS DAS PLANTAS
MEDICINAIS DO RENISUS

Flávio Viana Martins Júnior¹, Gabriel Novaes Moraes², Tiago Meira Oliveira³, Fabrício Santos Barbosa⁴, Nilton César Nogueira dos Santos⁵

RESUMO

O presente estudo tem por objetivo avaliar o potencial anti-inflamatório de espécies medicinais do bioma brasileiro presentes na lista da Relação Nacional de Plantas Medicinais de Interesse do SUS (RENISUS) como tratamento alternativo e complementar em inflamações odontogênicas. Por meio de um estudo quantitativo de cunho experimental e abordagem *in silico* (computacional). A fundamentação teórica será através de plataformas de bases de dados públicas, como PubMed, Scielo e Elsevier, Google acadêmico e triagem por meio de ferramentas computacionais para obtenção dos resultados de similaridade química e propriedades ADMETox das substâncias ativas naturais e dos fármacos obtidos na base *Pubchem* (<https://pubchemdocs.ncbi.nlm.nih.gov/compounds>), *Similarity Ensemble Approach* (SEA) (<https://sea.bkslab.org/>), Pk CSM, *Drugbank* (<https://go.drugbank.com/>), e *PDB proteíne*. Após a triagem da planta escolhida, seus compostos químicos serão identificados no estudo. As predições *in silico*, indicaram que a curcumina, luteolina, artemetina, quercertina, biochanina A e gingerol apresentaram similaridade química (0.71-1.00) para compostos que interagem com alvos farmacológicos envolvidos no bloqueio da inflamação periférica (PTGS1, PTGS2 e ALOX5). Os compostos naturais quando comparados com os anti-inflamatórios não-esteroidais (AINES) utilizados na terapêutica odontológica, apresentaram propriedades ADME promissoras. Os compostos descritos apresentam potencial farmacológico para desenvolvimento de futuros fitoterápicos e fitofármacos, sendo promissores para utilização pelo Cirurgião Dentista como estratégia da medicina alternativa complementar.

PALAVRAS-CHAVE: Anti-inflamatório; Bioma Brasileiro; Odontologia; Plantas medicinais.

Instituição de Fomento: Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq

¹ Estudante do curso de Odontologia da Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia (UESB), bolsista de iniciação científica pelo CNPq, Jequié-BA, e-mail: 202020802@uesb.edu.br

² Estudante do curso de Odontologia da Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia (UESB), bolsista de iniciação científica pelo CNPq, Jequié-BA, e-mail: 202020624@uesb.edu.br

³ Bacharel em odontologia pela Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia, Jequié-BA, e-mail: ticomeraoliveira@gmail.com

⁴ Doutorando em química pela Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia (UESB), Jequié-BA, e-mail: fabriciojka@gmail.com

⁵ Professor titular do curso de Odontologia, Departamento em Saúde I, da Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia, Jequié – BA, e-mail: santosncn@uesb.edu.br

THERAPEUTIC POTENTIAL OF PLANTS FROM THE BRAZILIAN BIOME AND THE
NORTHEASTERN SEMIARID REGION FOR ORAL HEALTH: APPLICATION AND
EFFECTIVENESS
ANTI-INFLAMMATORY POTENTIAL OF RENISUS MEDICINAL PLANTS FOR ORAL
CONDITIONS

ABSTRACT

The present study aims to evaluate the anti-inflammatory potential of medicinal species from the Brazilian biome included in the national list of medicinal plants of interest to SUS (Rénisus) as an alternative and complementary treatment for odontogenic inflammations. This will be conducted through a quantitative experimental study with an *in silico* (computational) approach. The theoretical framework will rely on public database platforms such as PubMed, Scielo, Elsevier, Google Scholar, and screening using computational tools to obtain results regarding chemical similarity and ADMET properties of natural active substances and drugs retrieved from PubChem (<https://pubchemdocs.ncbi.nlm.nih.gov/compounds>), Similarity Ensemble Approach (SEA) (<https://sea.bkslab.org/>), PKCSM, DrugBank (<https://go.drugbank.com/>), and PDB Protein. After the screening of the selected plant, its chemical compounds will be identified in the study. The *in silico* predictions indicated that curcumin, luteolin, artemetin, quercetin, biochanin A, and gingerol showed chemical similarity (0.71–1.00) to compounds that interact with pharmacological targets involved in blocking peripheral inflammation (PTGS1, PTGS2, and ALOX5). When compared to non-steroidal anti-inflammatory drugs (NSAIDs) used in dental therapy, the natural compounds presented promising ADMET properties. The described compounds demonstrate pharmacological potential for the development of future phytotherapeutics and phytopharmaceuticals, showing promise for use by dental surgeons as part of complementary alternative medicine strategies.

KEYWORDS: anti-inflammatory; Brazilian biome; dentistry; medicinal plants.

INTRODUÇÃO

A prática fitoterápica foi aprovada e regulamentada em 2008 pelo Conselho Federal de Odontologia (CFO). No Sistema Único de Saúde (SUS), sua prática foi regulamentada desde 2006 por meio da Política Nacional de Práticas Integrativas e Complementares em Saúde. No ano de 2009, instaurou a Relação Nacional de Plantas Medicinais de interesse do SUS, configura-se 71 plantas com potenciais medicamentosos que são investigadas, regulamentadas e tem seu potencial terapêutico reconhecido. Mesmo com normas que regulamentem o uso na prática clínica em processos de saúde e doença, por falta de conhecimento profissional, crenças, falta de confiança por insuficiência de acesso aos benefícios e a informações importantes sobre

o uso, faz com que a prática não seja tão utilizada na rotina diária, tanto da saúde pública em geral, como da Odontologia no Brasil (Costa et al., 2023).

A área odontológica em sua rotina diária tem anti-inflamatórios como fármacos comumente utilizados em prescrições, no entanto este grupo medicamentoso pode levar ao surgimento de efeitos adversos, o que podem influenciar na saúde do indivíduo, sendo um fator agravante em alguns casos ao sistema digestivo, às plaquetas, ou até mesmo os rins de pacientes (Moreira., 2020) Dessarte, medicamentos com potencial fitoterápicos que possuem efeitos anti-inflamatórios podem ser uma alternativa ao tratamento convencional farmacológico, o que pode permitir um menor agravamento ou consequências para os enfermos(Silva – Júnior et al., 2021)

Diante disso, o presente estudo tem como objetivo avaliar utilizando ferramentas de química computacional (*in silico*), a ação anti-inflamatória de espécies medicinais pertencentes ao bioma brasileiro presentes na lista do RENISUS como tratamento alternativo e complementar aos fármacos anti-inflamatórios empregado na terapêutica medicamentosa odontológica, utilizados em processos inflamatórios que acometem a cavidade oral

MATERIAIS E MÉTODOS

Trata-se de um estudo quantitativo de cunho experimental e abordagem de química computacional (*In silico e Docking molecular*), o desenvolvimento do projeto ocorreu em duas etapas:

1. Revisão de Literatura – Identificação de plantas medicinais do bioma brasileiro com potencial anti-inflamatório por meio de busca sistemática em bases de dados indexadas (PubMed, Scielo, Elsevier e Google Acadêmico). Foram utilizados descritores do DeCS, aplicados em português e inglês, associados ao nome científico das plantas e termos “Odontologia” e/ou “Anti-inflamatório”. Artigos foram selecionados conforme critérios de inclusão (compatibilidade temática) e exclusão (ausência de efeito anti-inflamatório). A extração de dados contemplou princípio ativo, efeito farmacológico e mecanismo de ação.

2. Análise *in silico* – Identificação e caracterização dos compostos ativos das plantas selecionadas.

Bases utilizadas: *PubChem, SEA, DrugBank, PDB e pkCSM.*

Comparação com fármacos de referência: Nimesulida, Ibuprofeno e Diclofenaco. Triagem virtual Baseada no Ligante (VSBL): obtenção dos SMILES dos compostos, análise de similaridade estrutural pelo Coeficiente de Tanimoto ($\geq 0,7$).

Docking molecular: seleção de 170 ligantes vegetais em formato 3D, preparação dos alvos proteicos (PTGS1) no PDB e execução dos cálculos de acoplamento pelo AutoDock Vina, com avaliação da energia de afinidade (kcal/mol).

Análises ADMETox: parâmetros farmacocinéticos e toxicológicos preditos no pkCSM, incluindo mutagenicidade, toxicidade, biodisponibilidade oral (Regra dos 5 de Lipinski) e propriedades físico-químicas.

Aspectos éticos: por não envolver seres humanos ou animais, não houve necessidade de submissão ao CEP.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os alvos moleculares selecionados para comparação com as substâncias anti-inflamatórias foram a *Prostaglandin GH Synthase 1 Humano (COX-1)*, *Prostaglandin GH Synthase 2 (COX-2)* e o *Arachidonate 5-lipoxygenase*, que estão diretamente relacionados na síntese de prostaglandinas e desenvolvimento de sinais inflamatórios (Lima 2020).

Tabela 01. Alvos moleculares e valores do Coeficiente de Tanimoto encontrados no Banco SEA para fármacos e compostos naturais.

Composto	Origem	Max TC PTGS1 (COX1)	Max TC PTGS2 (COX2)	Max TC ALOX5
Ibuprofeno	Fármaco Convencional	1.00	1.00	0.64
Nimesulida	Fármaco Convencional	1.00	1.00	0.38
Diclofenaco	Fármaco Convencional	1.00	1.00	0.00
Curcumina	<i>Curcuma Longa</i>	1.00	0.50	1.00
Artemetina	<i>Cordia verbenacea</i>	0.32	0.00	0.71
Quercertina	<i>Chamomilla recutita</i>	0.00	0.00	0.71
Luteolina	<i>Arrabidaea chica</i>	0.00	0.00	1.00
Biochanina A	<i>Trifolium pratense</i>	0.38	0.00	0.75
Gingerol	<i>Zingiber officinale</i>	0.00	0.00	0.70

XXIX Seminário de Iniciação Científica e Tecnológica 2025

Max TC: Coeficiente de Tanimoto, PTGS1: Prostaglandin GH synthase 1 (human), PTGS2: Prostaglandin GH synthase 2 (human), ALOX5: Arachidonate 5-lipoxygenase (human).

Stoyell et al. em 2016 demonstraram a eficácia da Curcumina no tratamento e prevenção de gengivite devido sua ação anti-inflamatória. Nas análises de similaridade com os alvos *Prostaglandin GH synthase 1* e *Arachidonate 5-lipoxygenase*, o composto da *Curcuma longa* foi o que apresentou o maior valor do Coeficiente de Tanimoto, evidenciando assim sua alta similaridade com os alvos estabelecidos. (Tabela 01). A Luteolina proveniente da *Arrabidea chica* (Tabela 01), apresentou alta similaridade com o alvo ALOX5.

Tabela 02: Predição da afinidade dos compostos naturais das plantas frente ao receptor PTGS1.

Planta	CID Composto	Energia de Ligação (kcal/mol)	Melhor Posição do Ligante
Zingiber officinale	145721020	-11,90	5
	115028	-11,41	2
Trifolium pratense	5492234	-10,45	7
	5358913	-9,44	10
Curcuma longa	44195235	-10,61	8
	44452360	-10,37	6
Cordia verbenácea	5281640	-9,74	3
	71597391	-9,28	2
Chamomilla recutita	5319116	-10,85	9
	5320844	-10,78	8
Arrabidea chica	5319484	-7,60	3
	13844658	-7,55	8

Resultado do Docking molecular usando os compostos das plantas. Energia de afinidade por (Kcal/mol). Posição de ligação das moléculas (1-9).

A análise das energias de ligação (Tabela 2), demonstram que os compostos da *Zingiber officinale* apresentaram os valores mais negativos (-11,90 e -11,41 kcal/mol, respectivamente), seguido pelo da *Chamomilla recutita* (-10,85 e -10,78 kcal/mol), o que pode evidenciar uma afinidade significativa pelo sítio ativo da PTGS1 e, portanto,

provável potencial inibitório. Essa forte interação sugere que esses compostos possam competir de forma eficaz, favorecendo o bloqueio da atividade catalítica.

É possível observar que alguns compostos presentes nas plantas *Arrabidaea Chica* e *Cordia Verbenácea* não apresentaram interações tão satisfatórias com a PTGS1 quanto outros avaliados. Esse comportamento pode ser explicado pelo fato de que essas substâncias podem estabelecer um número maior de interações e bloqueios em outras proteínas envolvidas no processo inflamatório, conforme evidenciado na Tabela 1, o que cabe a realização do docking com outras proteínas receptoras.

CONCLUSÕES/CONSIDERAÇÕES

Este estudo busca evidenciar o potencial das espécies medicinais do bioma brasileiro, presentes na Relação Nacional de Plantas Medicinais de Interesse do SUS (RENISUS), como alternativas terapêuticas promissoras para o tratamento de inflamações odontogênicas. Através de uma análise *in silico* detalhada, foi possível identificar compostos químicos naturais, como curcumina, luteolina, artemetina, quercetina, biochanina A e gingerol, que apresentam alta similaridade química com substâncias utilizadas em anti-inflamatórios não esteroidais (AINEs) e demonstram interações com alvos farmacológicos essenciais no bloqueio de processos inflamatórios periféricos. Esses compostos também apresentaram propriedades ADME favoráveis, destacando-se como possíveis candidatos para o desenvolvimento de fitoterápicos e fitofármacos de interesse odontológico. Portanto, os resultados indicam que essas substâncias têm grande potencial para serem exploradas como uma estratégia complementar na medicina alternativa aplicada à odontologia, proporcionando novas perspectivas para tratamentos menos invasivos e mais naturais para as inflamações relacionadas a procedimentos odontológicos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Brasil. Ministério da Saúde. Secretaria de Ciência, Tecnologia e Insumos Estratégicos. Departamento de Assistência Farmacêutica. Política Nacional de Plantas Medicinais e Fitoterápicos. Brasília: Ministério da Saúde; 2006. 60 p. (Série B. Textos Básicos de Saúde).

Conselho Federal de Odontologia - CFO. Resolução CFO-82/2008. Reconhece e regulamenta o uso pelo cirurgião-dentista de práticas integrativas e complementares à saúde bucal. Rio de Janeiro; 2008. 16 p.

Costa AC. Zingiber officinale: uma breve revisão das propriedades botânicas, fitoquímicas e farmacológicas aplicadas à odontologia. Universidade Federal de Campina Grande. Disponível em:

<http://dspace.sti.ufcg.edu.br:8080/jspui/handle/riufcg/30856>

Lima CP, Silva HR, Pogian VB (2020) Avaliação farmacêutica dos riscos do uso dos anti-inflamatórios não esteroidais. Unisanta Health Science 4(1):1-20.

Moreira VL. Uso de medicamentos fitoterápicos como opção anti-inflamatória na Odontologia. Escola Bahiana de Medicina e Saúde Pública. Disponível em:

<https://repositorio.bahiana.edu.br:8443/jspui/handle/bahiana/4596>

Silva Júnior EJ da, Santana RJ de, Silva Filho NJ da, Abreu LM de, Melo AP, Sabino MEB de O, Miguel RR dos S, de Andrade Veras SR. Evidences of the use of phytotherapes in dentistry: A review of the literature. RSD [Internet]. 6 ago 2021 [citado em 21 out 2024];10(10):e113101018167. Disponível em:

<https://rsdjournal.org/index.php/rsd/article/view/18167>

Metodologia:

Health Sciences Descriptors: DeCS [Internet]. São Paulo (SP): BIREME / PAHO / WHO; 2017 [atualizado em 18 mai 2017; citado em 13 jun 2017]. Disponível em:

<http://decs.bvsalud.org/l/homepagei.htm>

Miciaccia M, Belviso BD, Iaselli M, Cingolani G, Ferorelli S, Cappellari M, Loguercio Polosa P, Perrone MG, Caliendo R, Scilimati A. Three-dimensional structure of human cyclooxygenase-1. Scientific Reports. 2021;11:4312. DOI:10.1038/s41598-021-83438-Z.

Werner J Geldenhuys, Kevin E. Gaasch, Mark Watson, David D. Allen, Cornelis J. Van der Schyf. Optimizing the use of open-source software applications in drug discovery. Drug Discov. Today. 2006;11(3/4):127-132.

Morris GM, Huey R, Lindstrom W, Sanner MF, Belew RK, Goodsell DS, Olson AJ. AutoDock4 and AutoDockTools4: automated docking with selective receptor flexibility. J Comput Chem. 2009;16:2785-91.

Trott O, Olson AJ. AutoDock Vina: improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization, and multithreading. J Comput Chem. 2010;31(2):455-61. DOI: 10.1002/jcc.21334

Lipinski CA, Freeney PJ, Dominy W, et al. Experimental and computational approaches to estimate solubility and permeability in drug discovery and development settings. Adv Drug Deliv Rev. 2001;1:3-26. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0169-409X\(00\)00129-0](https://doi.org/10.1016/S0169-409X(00)00129-0)

pkCSM- pharmacokinetics [Internet]. Journal of Medicinal Chemistry: Douglas EV Pires, Tom L. Blundell, David B. Ascher. pkCSM: predicting small-molecule pharmacokinetic properties using graph-based signatures. Disponível em: <https://biosig.lab.uq.edu.au/pkcsm/>