

ATUALIZAÇÕES EM PROMOÇÃO DA SAÚDE 2



ORGANIZADORES

**AVELAR ALVES DA SILVA
LENNARA PEREIRA MOTA
PAULO SÉRGIO DA PAZ SILVA FILHO**



ATUALIZAÇÕES EM PROMOÇÃO DA SAÚDE 2



ORGANIZADORES

AVELAR ALVES DA SILVA
LENNARA PEREIRA MOTA
PAULO SÉRGIO DA PAZ SILVA FILHO





O conteúdo dos artigos e seus dados em sua forma, correção e confiabilidade são de responsabilidade exclusiva dos autores, inclusive não representam necessariamente a posição oficial do SCISAUDE. Permitido o download da obra e o compartilhamento desde que sejam atribuídos créditos aos autores, mas sem a possibilidade de alterá-la de nenhuma forma ou utilizá-la para fins comerciais.

Todos os manuscritos foram previamente submetidos à avaliação cega pelos pares, membros do Conselho Editorial desta Editora, tendo sido aprovados para a publicação com base em critérios de neutralidade e imparcialidade acadêmica.



LICENÇA CREATIVE COMMONS

A editora detém os direitos autorais pela edição e projeto gráfico. Os autores detêm os direitos autorais dos seus respectivos textos. ATUALIZAÇÕES EM PROMOÇÃO DA SAÚDE 2 de [SCISAUDE](#) está licenciado com uma Licença [Creative Commons - Atribuição-NãoComercial-SemDerivações 4.0 Internacional](#). (CC BY-NC-ND 4.0). Baseado no trabalho disponível em <https://www.scisaude.com.br/catalogo/atualizacoes-em-promocao-da-saude-2/75>

2024 by SCISAUDE

Copyright © SCISAUDE

Copyright do texto © 2024 Os autores

Copyright da edição © 2024 SCISAUDE

Direitos para esta edição cedidos ao SCISAUDE pelos autores.

Open access publication by SCISAUDE



ATUALIZAÇÕES EM PROMOÇÃO DA SAÚDE 2

ORGANIZADORES

Dr. Avelar Alves da Silva

<http://lattes.cnpq.br/8204485246366026>

<https://orcid.org/0000-0002-4588-0334>

Me. Paulo Sérgio da Paz Silva Filho

<http://lattes.cnpq.br/5039801666901284>

<https://orcid.org/0000-0003-4104-6550>

Esp. Lennara Pereira Mota

<http://lattes.cnpq.br/3620937158064990>

<https://orcid.org/0000-0002-2629-6634>

Editor chefe

Paulo Sérgio da Paz Silva Filho

Projeto gráfico

Lennara Pereira Mota

Diagramação:

Paulo Sérgio da Paz Silva Filho

Lennara Pereira Mota

Revisão:

Os Autores



Conselho Editorial

Ana Flavia de Oliveira Ribeiro	Elane da Silva Barbosa	Juliane Maguetas Colombo Pazzanese
Ana Florise Morais Oliveira	Francine Castro Oliveira	Júlia Maria do Nascimento Silva
André de Lima Aires	Giovanna Carvalho Sousa Silva	Kaline Malu Gerônimo Silva dos Santos
Angélica de Fatima Borges Fernandes	Heloísa Helena Figuerêdo Alves	Laíza Helena Viana
Camila Tuane de Medeiros	Jamile Xavier de Oliveira	Leandra Caline dos Santos
Camilla Thaís Duarte Brasileiro	Jean Carlos Leal Carvalho De Melo Filho	Lennara Pereira Mota
Carla Fernanda Couto Rodrigues	João Paulo Lima Moreira	Luana Bastos Araújo
Daniela de Castro Barbosa Leonello	Juliana Britto Martins de Oliveira	Maria Isabel Soares Barros
Dayane Dayse de Melo Costa	Juliana de Paula Nascimento	Maria Luiza de Moura Rodrigues
Maria Vitalina Alves de Sousa	Raissa Escandiusi Avramidis	Wesley Romário Dias Martins
Maryane Karolyne Buarque Vasconcelos	Renata Pereira da Silva	Wilianne da Silva Gomes
Paulo Sérgio da Paz Silva Filho	Sannya Paes Landim Brito Alves	Willame de Sousa Oliveira
Mayara Stefanie Sousa Oliveira	Suellen Aparecida Patricio Pereira	Naila Roberta Alves Rocha
Michelle Carvalho Almeida	Thamires da Silva Leal	Neusa Camilla Cavalcante Andrade Oliveira
Márcia Farsura de Oliveira		



**Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
(Câmara Brasileira do Livro, SP, Brasil)**

Atualizações em promoção da saúde 2 [livro eletrônico] / organização Avelar Alves da Silva, Paulo Sérgio da Paz Silva Filho, Lennara Pereira Mota. -- Teresina, PI : SCISAUDE, 2025. PDF

Vários autores.
Bibliografia.
ISBN 978-65-85376-61-7

1. Promoção da saúde 2. Saúde - Brasil 3. Saúde pública 4. Sistema Único de Saúde (Brasil) I. Silva, Avelar Alves da. II. Silva Filho, Paulo Sérgio da Paz. III. Mota, Lennara Pereira.

25-251718

CDD-613

Índices para catálogo sistemático:

1. Saúde : Promoção da saúde : Ciências médicas 613

Eliane de Freitas Leite - Bibliotecária - CRB 8/8415



10.56161/sci.ed.20250217



978-65-85376-61-7



SCISAUDE
Teresina – PI – Brasil
sciencesaude@hotmail.com
www.scisaude.com.br



APRESENTAÇÃO

A promoção da saúde é um pilar essencial para a construção de sociedades mais saudáveis e resilientes. Com o avanço das pesquisas e a necessidade de abordagens cada vez mais integradas e interdisciplinares, "**Atualizações em Promoção da Saúde 2**" surge como uma obra fundamental para profissionais, pesquisadores e estudantes que desejam aprofundar seus conhecimentos sobre o tema.

Este livro reúne uma série de estudos atualizados, abordando estratégias inovadoras, políticas públicas, desafios contemporâneos e práticas bem-sucedidas na promoção da saúde. A diversidade dos temas tratados reflete a amplitude desse campo, explorando desde a atenção primária até a implementação de tecnologias na saúde, passando por programas de prevenção, educação em saúde e análise epidemiológica.

Com uma linguagem clara e fundamentação científica rigorosa, "**Atualizações em Promoção da Saúde 2**" é uma leitura indispensável para aqueles que buscam compreender as novas tendências e contribuir para a efetivação de ações voltadas ao bem-estar da população.

Este livro não apenas compartilha conhecimento, mas também incentiva a reflexão crítica e a aplicação de estratégias baseadas em evidências para um futuro mais saudável e sustentável.

Boa Leitura!!!



CAPÍTULO 1.....	9
ASSISTÊNCIA DE ENFERMAGEM BASEADA NA TEORIA DO AUTOUIDADO PARA PACIENTES COM EPIDERMÓLISE BOLHOSA	9
10.56161/sci.ed.20250217C1	9
CAPÍTULO 2.....	17
AVALIAÇÃO CLÍNICA E FARMACOTERAPÊUTICA EM ESCLEROSE MÚLTIPLA: ESTUDO DE CASO EM HOSPITAL UNIVERSITÁRIO	17
10.56161/sci.ed.20250217C2	17
CAPÍTULO 3.....	27
BIOTECNOLOGIA E BIOFORTIFICAÇÃO: SOLUÇÕES SUSTENTÁVEIS PARA COMBATER A DEFICIÊNCIA NUTRICIONAL GLOBAL.....	27
10.56161/sci.ed.20250217C3	27
CAPÍTULO 4.....	36
EDUCAÇÃO EM SAÚDE E EDUCAÇÃO PERMANENTE EM SAÚDE: ESTRATÉGIAS PARA FORTALECIMENTO DO SUS	36
10.56161/sci.ed.20250217C4	36
CAPÍTULO 5.....	49
SAÚDE SEXUAL NA ADOLESCÊNCIA: DESAFIOS E ESTRATÉGIAS NA PREVENÇÃO DAS ISTs E DO HIV/AIDS.....	49
10.56161/sci.ed.20250217C5	49
CAPÍTULO 6.....	63
LEVANTAMENTO DOS CASOS DE LEUCEMIA NO BRASIL: EPIDEMIOLOGIA, DIAGNOSTICO E TRATAMENTO	63
10.56161/sci.ed.20250217C6	63
CAPÍTULO 7.....	83
EFEITOS COLATERAIS ASSOCIADOS AO USO DE ANTICONCEPCIONAIS: UMA ANÁLISE DOS RISCOS NA SAÚDE FEMININA	83
10.56161/sci.ed.20250217C7	83
CAPÍTULO 8.....	97
ENVELHECIMENTO EM SITUAÇÃO DE RUA: DESAFIOS BIOPSISSOCIAIS E IMPACTOS NA SAÚDE DE IDOSOS EM VULNERABILIDADE	97
10.56161/sci.ed.20250217C8	97
CAPÍTULO 9.....	107
NO ENSINO SUPERIOR: REPERCUSSÕES NA SAÚDE MENTAL E NA FORMAÇÃO ACADÊMICA.....	107
10.56161/sci.ed.20250217C9	107
CAPÍTULO 10.....	116



IMPACTOS EPIDEMIOLÓGICOS DE DESASTRES NATURAIS HÍDRICOS NA SAÚDE PÚBLICA	116
10.56161/sci.ed.20250217C10	116
CAPÍTULO 11.....	128
USO DE PLANTAS MEDICINAIS NO TRATAMENTO DE INFECÇÕES DO TRATO URINÁRIO: REVISÃO INTEGRATIVA DA LITERATURA.....	128
10.56161/sci.ed.20250217C11	129
CAPÍTULO 12.....	141
VIOLÊNCIA OBSTÉTRICA E SAÚDE DA MULHER: RISCOS, PROTEÇÃO E REPERCUSSÕES FÍSICAS E MENTAIS	141
10.56161/sci.ed.20250217C12	141
CAPÍTULO 13.....	150
POTENCIAL BIOINSETICIDA GÊNERO <i>Eugenia</i> L. (MYRTACEAE) FRENTE A <i>Aedes aegypti</i> (DIPTERA: CULICIDAE): UMA REVISÃO	150
10.56161/sci.ed.20250217C13	150
CAPÍTULO 14.....	161
ANÁLISE <i>IN SILICO</i> DO POTENCIAL ANTI-SARS-COV-2 DOS COMPOSTOS MAJORITÁRIOS DO ÓLEO ESSENCIAL DAS FOLHAS DE AROEIRA (<i>Myracrodruon urundeuva</i>)	161
10.56161/sci.ed.20250217C14	161
CAPÍTULO 15.....	170
ASSOCIAÇÃO ENTRE A SÍNDROME METABÓLICA E A DOENÇA DE ALZHEIMER.....	170
10.56161/sci.ed.20250217C15	170
CAPÍTULO 16.....	180
CARACTERÍSTICAS DO DIABETES MELLITUS GESTACIONAL: UMA REVISÃO DO DIAGNÓSTICO AO TRATAMENTO.....	180
10.56161/sci.ed.20250217C16	180
CAPÍTULO 17.....	193
FUNGOS CONTRA O CÂNCER: EXPLORANDO NOVAS ALTERNATIVAS TERAPÊUTICAS PARA O CÂNCER DE MAMA	193
10.56161/sci.ed.20250217C17	193
CAPÍTULO 18.....	206
AVALIAÇÃO E INTERVENÇÃO DE ENFERMAGEM EM CASOS DE ABUSO INFANTIL	206
10.56161/sci.ed.20250217C18	206
CAPÍTULO 19.....	216
GARANTINDO A SEGURANÇA NAS AULAS DE EDUCAÇÃO FÍSICA: A IMPORTÂNCIA DOS PRIMEIROS SOCORROS	216
10.56161/sci.ed.20250217C19	216



CAPÍTULO 20.....	226
POTENCIAL BIOINSETICIDA GÊNERO <i>Eugenia</i> L. (MYRTACEAE) FRENTE A <i>Aedes aegypti</i> (DIPTERA: CULICIDAE): UMA REVISÃO	226
10.56161/sci.ed.20250217C20	226
CAPÍTULO 21.....	237
RISCO DE DEPRESSÃO PÓS-PARTO EM MÃES DE PREMATUROS EM UTIN: UMA REVISÃO DE ESCOPO	237
10.56161/sci.ed.20250217C21	237



CAPÍTULO 14

ANÁLISE *IN SILICO* DO POTENCIAL ANTI-SARS-COV-2 DOS COMPOSTOS MAJORITÁRIOS DO ÓLEO ESSENCIAL DAS FOLHAS DE AROEIRA (*Myracrodruon urundeuva*)

IN SILICO ANALYSIS OF THE ANTI-SARS-COV-2 POTENTIAL OF THE MAJOR
COMPOUNDS OF THE ESSENTIAL OIL OF AROEIRA LEAVES (*Myracrodruon
urundeuva*)

 10.56161/sci.ed.20250217C14

Francisca Rafaela Ferreira de Souza

Graduanda em Ciências Biológicas pela Universidade Federal do Delta do Parnaíba -
UFDFPar

Orcid ID do autor <https://orcid.org/0009-0009-6881-7440>

Ruan Pábulo Bandeira Pinto

Graduando em Ciências Biológicas pela Universidade Federal do Delta do Parnaíba -
UFDFPar

Orcid ID do autor <https://orcid.org/0009-0004-1984-5502>

Deyvid Alves Zeidan

Graduando em Ciências Biológicas pela Universidade Federal do Delta do Parnaíba -
UFDFPar

Orcid ID do autor <https://orcid.org/0009-0005-2167-4404>

Ana Luiza Castro Pereira

Graduanda em Ciências Biológicas pela Universidade Federal do Delta do Parnaíba -
UFDFPar

Orcid ID do autor <https://orcid.org/0009-0004-9253-1817>

José Tayllan Fonteles de Lima

Graduanda em Ciências Biomédicas pela Universidade Federal do Delta do Parnaíba -
UFDFPar

Orcid ID do autor <https://orcid.org/0009-0004-4969-9155>

Larissa Gaspar Borges

Graduada em Ciências Biomédicas pela Unidade de Ensino Superior Dom Bosco (UNDB)

Orcid ID do autor <https://orcid.org/0009-0001-1738-6988>

Luiza Aragão Paiva Pires Ferreira Mendes



Mestra Ciências Biomédicas pela Universidade Federal do Delta do Parnaíba - UFDPAr
Orcid ID do autor <https://orcid.org/0000-0002-4017-6102>

Alvaro Araujo Galeno

Mestrando em Biotecnologia pela Universidade Federal do Delta do Parnaíba - UFDPAr
Orcid ID do autor <https://orcid.org/0009-0005-4995-3069>

Nagila Iane Pacheco

Doutoranda em Biotecnologia pela Universidade Federal do Delta do Parnaíba - UFDPAr
Orcid ID do autor <https://orcid.org/0000-0002-2836-1639>

Paulo Sérgio de Araujo Sousa

Doutorando em Biotecnologia pela Universidade Federal do Delta do Parnaíba - UFDPAr
Orcid ID do autor <https://orcid.org/0000-0001-8764-4455>

RESUMO

O SARS-CoV-2, agente etiológico da COVID-19, atingiu uma grave crise sanitária global, levando a Organização Mundial da Saúde (OMS) a declarar pandemia em 2020. O ciclo de replicação do vírus envolve uma clivagem de poliproteínas, mediada pela protease Mpro, um alvo terapêutico promissor devido à sua especificidade e conservação entre os coronavírus. Nesse contexto, *Myracrodruon urundeuva*, planta tradicionalmente utilizada em tratamentos terapêuticos, destaca-se como fonte potencial de agentes antivirais. Estudos indicam que o óleo essencial de suas folhas apresenta propriedades bioativas, como atividade anti-inflamatória, antioxidante e antimicrobiana, além de baixa toxicidade para células humanas (Costa *et al.*, 2014). Este estudo teve como objetivo avaliar, por meio de simulações *in silico*, a interação dos compostos majoritários do óleo essencial de *M. urundeuva* com o Mpro do SARS-CoV-2, identificar potenciais inibidores de replicação viral. As estruturas das composições foram otimizadas com a Teoria do Funcional da Densidade (DFT), e as interações moleculares foram simuladas com a proteína Mpro (PDB: 6LU7). Entre os compostos complementares, o 14-Hidroxi-9-epicariofileno apresentou a melhor energia de ligação (-5,1 kcal/mol) com o Mpro, apresentando uma interação forte com o sítio ativo da proteína. Outros compostos, como Δ -selineno, também mostraram resultados promissores. Os resultados indicam que os constituintes do óleo essencial de *M. urundeuva* podem interferir na atividade catalítica do Mpro, bloqueando a clivagem das poliproteínas virais essenciais à replicação do vírus. Esses achados sugerem o potencial da planta no desenvolvimento de terapias antivirais contra a COVID-19, oferecendo uma nova abordagem para o tratamento da doença.

PALAVRAS-CHAVE: Coronavírus; docagem molecular; Mpro; abordagens terapêuticas.

ABSTRACT

SARS-CoV-2, the etiological agent of COVID-19, has caused a serious global health crisis, leading the World Health Organization (WHO) to declare a pandemic in 2020. The virus replication cycle involves polyprotein cleavage, mediated by the Mpro protease, a promising therapeutic target due to its specificity and conservation among coronaviruses. In this context, *Myracrodruon urundeuva*, a plant traditionally used in therapeutic treatments, stands out as a potential source of antiviral agents. Studies indicate that the essential oil of its leaves has bioactive properties, such as anti-inflammatory, antioxidant and antimicrobial activity, in



addition to low toxicity to human cells (Costa et al., 2014). This study aimed to evaluate, through in silico simulations, the interaction of the major compounds of the essential oil of *M. urundeuva* with the Mpro of SARS-CoV-2, identifying potential inhibitors of viral replication. The structures of the compounds were optimized with Density Functional Theory (DFT), and the molecular interactions were simulated with the Mpro protein (PDB: 6LU7). Among the complementary compounds, 14-Hydroxy-9-epicaryophyllene showed the best binding energy (-5.1 kcal/mol) with Mpro, showing a strong interaction with the active site of the protein. Other compounds, such as Δ -selinene, also showed promising results. The results indicate that the constituents of the essential oil of *M. urundeuva* can interfere with the catalytic activity of Mpro, blocking the cleavage of viral polyproteins essential for virus replication. These findings suggest the potential of the plant in the development of antiviral therapies against COVID-19, offering a new approach for the treatment of the disease.

KEYWORDS: Coronavirus; molecular docking; Mpro; therapeutic approaches.

1. INTRODUÇÃO

O SARS-CoV-2, agente etiológico da COVID-19, é um vírus de grande importância epidemiológica, responsável por uma das mais graves crises sanitárias da história contemporânea. Também denominado vírus da Síndrome Respiratória Aguda Grave (SARS), pertence à família *Coronaviridae* e ao gênero Betacoronavirus, sendo caracterizado como um vírus de RNA de fita simples, sentido positivo, envolto por um envelope lipídico que facilita sua entrada nas células hospedeiras. A rápida disseminação do SARS-CoV-2 e seus impactos devastadores sobre a saúde pública e a economia global levaram a Organização Mundial da Saúde (OMS) a declarar a COVID-19 como uma pandemia em março de 2020 (Sá *et al.*, 2021).

As síndromes respiratórias agudas (SARS) são específicas para um conjunto de condições clínicas caracterizadas por infecções respiratórias de instalação rápida, com sintomas intensos, como tosse, dispneia, febre e desconforto torácico. Essas síndromes afetam predominantemente as vias aéreas superiores e inferiores e podem variar em termos de gravidade, com potencial de evolução para complicações graves, especialmente em pacientes com comorbidades ou sistema imunológico comprometido (Iser *et al.*, 2020; Amorin *et al.*, 2024).

O Coronavírus, novo agente viral emergente, é atendido rapidamente pelo mundo, impondo desafios significativos à saúde pública, à economia e à sociedade como um todo. A partir desse período, diversas estratégias de prevenção e tratamento foram inovadoras para controlar a propagação do vírus, incluindo o desenvolvimento de vacinas que se mostraram eficazes na redução das formas graves da doença e no rompimento do impacto sobre os sistemas de saúde (Lana *et al.*, 2020; Souza *et al.*, 2021; Amorin *et al.*, 2024).



O SARS-CoV-2 é o agente causador da COVID-19, e seu ciclo de replicação envolve uma série de processos específicos. Após a entrada do vírus nas células hospedeiras, ocorre a replicação do genoma viral, seguida pela síntese de proteínas, montagem de novas partículas virais e, finalmente, a liberação de partículas para infectar novas células. O genoma do SARS-CoV-2 codifica duas poliproteínas, pp1a e pp1ab, além de quatro proteínas estruturais essenciais para a formação do vírus. Essas poliproteínas passam por um processo de clivagem pela protease principal (Mpro ou 3CL) do vírus em 11 locais específicos, gerando proteínas não estruturais (nsps) de tamanho menor, que são fundamentais para a replicação viral. Elas desempenham papéis importantes, como a síntese do RNA subgenômico, necessária para produzir proteínas estruturais do vírus, como o envelope, membrana, espícula e nucleocapsídeo. Além disso, esses nsp ajudam a suprimir a resposta antiviral da célula hospedeira, incluindo a ação de interferons (Song *et al.*, 2024)

A Mpro se destaca por sua importância no ciclo de replicação do vírus, tornando-se uma promessa terapêutica no desenvolvimento de medicamentos antivirais. A prevenção do vírus pode interromper a replicação viral, o que pode diminuir a propagação do vírus e até promover uma resposta imune eficaz. Uma grande vantagem em mirar na Mpro como alvo para medicamentos é a sua conservação entre os coronavírus. Apesar da diversidade genética dentro da família Coronaviridae, o Mpro apresenta uma estrutura e sequência altamente semelhantes entre várias cepas de coronavírus, incluindo o SARS-CoV-2, o MERS-CoV (coronavírus da síndrome respiratória do Oriente Médio) e, possivelmente, outros coronavírus que surgirão no futuro. Como não existe um homólogo humano para o Mpro e sua especificidade de substrato é distinta de qualquer protease humana conhecida, isso torna possível desenvolver inibidores da Mpro que sejam altamente eficazes, com impacto mínimo nas proteases humanas, o que pode reduzir os efeitos colaterais típicos de outros antivirais (Zagórska *et al.*, 2024; Sá *et al.*, 2021; Santos *et al.*, 2022).

Nesse contexto, a aroeira (*Myracrodruon urundeuva*), também conhecida como aroeira-do-sertão, urundeuva, aroeira-preta e aroeira-do-campo, surge como uma planta de grande interesse farmacológico. Pertencente ao gênero *Myracrodruon* e à família Anacardiaceae, essa espécie apresenta ampla distribuição no bioma Caatinga e é amplamente empregada na medicina popular devido às suas propriedades terapêuticas. As folhas e cascas de *M. urundeuva* são tradicionalmente utilizadas no tratamento de inflamações, infecções e doenças respiratórias, e estudos científicos recentes têm reforçada sua importância como uma fonte potencial de agentes antivirais. O óleo essencial de *Myracrodruon urundeuva* possui um amplo espectro bioativo e baixa toxicidade para células humanas, consolidando-se como um



candidato promissor para o desenvolvimento de novas abordagens terapêuticas. Esses resultados são respaldados por uma base crescente de evidências científicas, que identificam a presença de metabólitos secundários com propriedades anti-inflamatórias, antioxidantes e antimicrobianas. Tais características reforçam a relevância da planta nas pesquisas biomédicas, abrindo novas possibilidades para a exploração de seus compostos no tratamento de diversas condições patológicas (Costa *et al.*, 2014).

Diante dessas considerações, o presente estudo teve como objetivo avaliar *in silico* o potencial anti-SARS-CoV-2 dos constituintes majoritários do óleo essencial das folhas de *M. urundeuva*, por meio da interação molecular com a protease Mpro, buscando identificar composições bioativas capazes de interferir no ciclo replicativo do vírus e, assim, contribuir para o desenvolvimento de estratégias terapêuticas eficazes contra a COVID-19.

2. MATERIAIS E MÉTODOS

As estruturas moleculares dos compostos 14-Hidroxi-9-epicariofileno, β -cadineno, β -selineno, β -mirceno, linalol, trans-cariofileno e hidroxicloroquina foram projetadas e posteriormente otimizadas utilizando os softwares GaussView 5 e Gaussian 09w. A otimização molecular foi conduzida com base na Teoria do Funcional da Densidade (DFT), empregando o funcional híbrido B3LYP e o conjunto de bases STO-3G, garantindo uma descrição precisa da estrutura eletrônica dos compostos e sua estabilidade conformacional.

A estrutura tridimensional da protease principal (Mpro) do SARS-CoV-2 foi obtida no Banco de Dados de Proteínas (PDB) sob o código 6LU7, representando um dos alvos terapêuticos mais treinados para o desenvolvimento de inibidores antivirais. Tanto a proteína quanto os ligantes foram preparados para as simulações de interação molecular utilizando o software AutoDockTools, garantindo a parametrização adequada dos compostos antes da realização das docagens moleculares.

Para a predição dos complexos ligante-proteína, foi utilizada uma caixa cúbica de 25×25×25 pontos, centrada no sítio ativo do Mpro, delimitando a região de interação dos compostos testados. As configurações de docagem foram mantidas nos valores padrão, permitindo uma análise sistemática das interações entre os ligantes e a protease viral.

Além das análises energéticas, a inspeção visual dos complexos selecionados foi realizada com base nas melhores energias de ligação, permitindo uma avaliação qualitativa das interações moleculares e da acomodação dos ligantes no sítio ativo da Mpro. Essa abordagem integrada, combinando cálculos teóricos e inspeção estrutural, revelou uma caracterização robusta das interações entre os compostos do óleo essencial de *M. urundeuva* e a protease viral,



evidenciando o potencial bioativo dessas moléculas no contexto de inibição da replicação do SARS-CoV-2.

3. RESULTADOS

Os resultados referentes as docagens moleculares dos compostos majoritários do óleo essencial de *M. urundeuva* com a proteína 6LU7 são apresentados na Tabela 1.

Tabela 01 – Parâmetros de afinidade molecular dos compostos majoritários do óleo essencial de *M. urundeuva* com a proteína M^{pro}.

Complexo (Ligante-proteína)	ΔG^a (kcal.mol ⁻¹)	Aminoácidos que interagem com os ligantes
Beta-cadineno-6lu7	-4,7	SER A: 46, THR A: 45, THR A: 25, THR A: 24, THR A: 26, MET A: 49, CYS A: 145, LEU A: 27, HIS A: 41, GLY A: 143, LEU C: 4, VAL A: 3, ASN A: 142
Beta-mirceno-6lu7	-3,3	ASN A: 142, MET A: 49, LEU C: 4, HIS A: 41, GLY A: 143, THR A: 25, THR A: 26, LEU A: 27, CYS A: 145
Linalol-6lu7	-4,4	GLU A: 166, VAL C: 3, MET A: 165, CYS A: 145, LEU C: 4, HIS A: 172, HIS A: 163, GLY A: 143, SER A: 144, PHE A: 140, LEU A: 141, ASN A: 142
Trans-cariofileno-6lu7	-4,8	SER A: 46, MET A: 49, ASN A: 142, LEU C: 4, GLY A: 143, HIS A: 41, CYS A: 145, LEU A: 27, THR A: 26, THR A: 25
Delta-selineno	-4,9	THR A: 24, SER A: 46, THR A: 45, THR A: 25, THR A: 26, LEU A: 27, CYS A: 145, LEU C: 4, HIS A: 41, GLY A: 143, ASN A: 142, MET A: 49
14-Hydroxy-9-epicariofileno-6lu7	-5,1	LEU C: 4, CYS A: 145, SER A: 144, GLY A: 143, LEU A: 27, ASN A: 142, THR A: 26, THR A: 24, THR A: 25, THR A: 45, MET A: 49, HIS A: 41
Hidroxicloroquina-6lu7	-4,8	THR A: 26, THR A: 24, THR A: 25, MET A: 49, LEU C: 4, LEU A: 27, HIS A: 41, LEU A: 141, PHE A: 140, HIS A: 163, SER A: 144, CYS A: 145, GLY A: 143, ASN A: 142

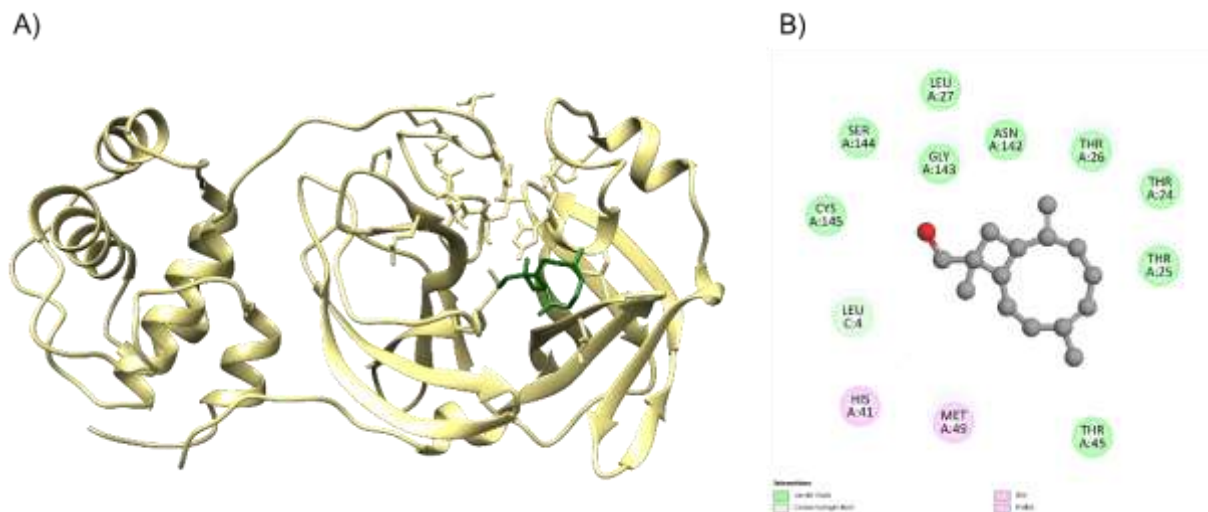
a = Energia livre de Gibbs.



Fonte: Autoria própria, 2024.

A melhor energia de interação foi gerada para o complexo 14-Hydroxy-9-epicariofileno-6lu7. A afinidade foi observada com uma energia de ligação igual a $-5,1 \text{ kcal.mol}^{-1}$ (Tabela 1; Figura 1). Na formação deste complexo, foi possível observar interações com os aminoácidos LEU C: 4, CYS A: 145, SER A: 144, GLY A: 143, LEU A: 27, ASN A: 142, THR A: 26, THR A: 24, THR A: 25, THR A: 45, MET A: 49, HIS A: 41 do sítio ativo da proteína com o ligante 14-Hydroxy-9-epicariofileno.

Figura 1 – Docagem molecular do complexo 14-Hydroxy-9-epicariofileno com a proteína M^{PRO}. A) Proteína M^{PRO} (Cor: khaki) e 14-Hydroxy-9-epicariofileno (Cor: Verde); B) Interação do 14-Hydroxy-9-epicariofileno com os aminoácidos do sítio ativo da M^{PRO}.



Fonte: Autoria própria, 2024.

4. DISCUSSÃO

A energia de interação experimentada para os ligantes 14-Hydroxy-9-epicariofileno e Δ -selineno foi superior à da droga controle hidroxicloroquina, conforme apresentado na Tabela 1. Essa comparação demonstra que os compostos presentes no óleo essencial de *Myracrodruon urundeuva* possuem características moleculares que favorecem uma interação mais forte e eficaz com a proteína Mpro (protease principal) do SARS-CoV-2. Essa evidência sugere que essas moléculas podem ter um desempenho superior ao da hidroxicloroquina em termos de eficácia na inibição da replicação viral.

Os compostos 14-Hydroxy-9-epicariofileno e Δ -selineno, identificados no óleo essencial das folhas de *M. urundeuva*, interagem diretamente com os aminoácidos do sítio ativo da protease Mpro, uma enzima fundamental para a replicação do SARS-CoV-2. Essa interação molecular ocorre por meio de ligações específicas com resíduos de chave enzimática, o que pode interferir na sua capacidade de processamento de poliproteínas virais. As poliproteínas, que são traduzidas a partir do RNA viral, passam por clivagens realizadas pela Mpro para formar proteínas funcionais essenciais para a formação de novas partículas virais. Se esses compostos forem capazes de bloquear ou modificar essa atividade catalítica, isso pode resultar na interrupção do ciclo de replicação viral.



Esses achados reforçam o potencial terapêutico dos componentes bioativos do óleo essencial de *M. urundeuva* no combate à COVID-19, fornecendo uma base sólida para investigações futuras sobre o uso de extratos dessa planta no desenvolvimento de novos fármacos antivirais. A interação mais eficaz desses compostos com o Mpro também abre perspectivas promissoras para a descoberta de novos tratamentos baseados em produtos naturais, que podem atuar de forma mais eficiente no controle da infecção e na mitigação dos impactos causados pelo SARS-CoV-2.

5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os resultados deste estudo indicam que os constituintes majoritários do óleo essencial das folhas de *Myracrodruon urundeuva* possuem a capacidade de interagir com a protease Mpro, conforme demonstrado pelas análises de docagem molecular. A interação dessas composições ocorre predominantemente no sítio ativo da enzima, proporcionando seu potencial para inibir a atividade catalítica da Mpro. Essa prevenção pode comprometer o processamento das poliproteínas virais essenciais para a replicação do SARS-CoV-2, abrindo perspectivas para o desenvolvimento de novas estratégias terapêuticas contra o COVID-19.

REFERÊNCIAS

- AMORIM, B. L. M. *et al.* Coronavírus e síndromes respiratórias agudas (MERS e SARS): Sintomas, diagnóstico e abordagens terapêuticas. **Journal of Medical and Biosciences Research**, v. 1, n. 4, p. 852-862, 2024.
- COSTA, O. B. *et al.* Essential oil constituents and yields from leaves of *Blepharocalyx salicifolius* (Kunt) O. Berg and *Myracrodruon urundeuva* (Allemão) collected during daytime. **International Journal of Forestry Research**, v. 2014, 2014.
- ISER, B. P. M. *et al.* Definição de caso suspeito da COVID-19: uma revisão narrativa dos sinais e sintomas mais frequentes entre os casos confirmados. **Epidemiologia e Serviços de Saúde**, v. 29, n. 3, p. e2020233, 2020.
- LANA, R. M. *et al.* Emergência do novo coronavírus (SARS-CoV-2) e o papel de uma vigilância nacional em saúde oportuna e efetiva. **Cadernos de Saúde Pública**, v. 36, n. 3, p. e00019620, 2020.
- SÁ, É. R. A. *et al.* *In silico* study of the interactions of *Pilocarpus microphyllus* imidazolic alkaloids with the main protease (Mpro) of SARS-CoV-2. **Molecular Simulation**, v. 47, n. 1, p. 74-87, 2021.
- SANTOS, E. S. *et al.* Antiviral potential of diminazene aceturate against SARS-CoV-2 proteases using computational and *in vitro* approaches. **Chemico-Biological Interactions**, v. 367, p. 110161, 2022.
- SONG, L. *et al.* Medicinal chemistry strategies towards the development of non-covalent SARS-CoV-2 Mpro inhibitors. **Acta Pharmaceutica Sinica B**, v. 14.



SOUZA, L.C. *et al.* SARS-CoV, MERS-CoV e SARS-CoV-2: uma revisão narrativa dos principais Coronavírus do século. **Brazilian Journal of Health Review**, Curitiba, v.4, n.1, p.1419-1439 Jan/Feb. 2021.

ZAGÓRSKA, A. *et al.* Inhibitors of SARS-CoV-2 main protease (Mpro) as anti-coronavirus agents. **Biomolecules**, v. 14, n. 7, p. 797, 2024., n. 1, p. 87-109, 2024.

