

Análise da composição química volátil de *Plectranthus neochilus* Schltr. (Lamiaceae) e predição *in silico* da bioatividade dos compostos majoritários.

Matheus G. de Oliveira¹, Camila A. Romano¹, Lilliane de S. Silva¹, Andressa T. S. Paz¹,
Lídia V. de Sousa¹, Vinicius B. da Silva², José R. de Paula¹

¹Universidade Federal de Goiás - Goiás, Brazil

²Pontifícia Universidade Católica de Goiás - Goiás, Brazil
matheusgabriel06@hotmail.com

Palavras-chave: boldo-gambá, óleo essencial, controle de qualidade, métodos computacionais, atividade biológica.

Plectranthus neochilus Schltr. é uma erva aromática nativa do continente Africano e conhecida no Brasil como boldo-gambá. É cultivada como planta ornamental e utilizada na medicina tradicional sob a forma de infusão para o tratamento de dispepsia e insuficiência hepática (1). A característica aromática da espécie tem estimulado a obtenção e análise química de seu óleo volátil, porém são poucos os estudos que evidenciam suas atividades biológicas. O objetivo deste estudo foi verificar a composição volátil de *P. neochilus* cultivada em Goiânia (GO) e avaliar os potenciais de atividade dos compostos majoritários do óleo por meio de predição *in silico*. As folhas de *P. neochilus* foram coletadas em Goiânia em maio de 2018. O óleo foi extraído a partir de 200g das folhas frescas por hidrodestilação em um aparelho de Clevenger por duas horas, e posteriormente submetido à cromatografia gasosa acoplada a espectrometria de massas. Foi utilizado cromatógrafo Shimadzu GC-MSQP5050A, coluna de sílica SBD-5 (30m x 0,25mm x 0,25µm), temperatura inicial de 60 até 280 °C com rampa de aquecimento de 10°C/min. A estrutura 2D dos compostos majoritários foi submetida à predição de atividade biológica através do servidor PASS (2), onde as atividades com Pa (probabilidade de ser ativo) > Pi (probabilidade de ser inativo) foram selecionadas para as análises, e predição de toxicidade com o servidor pkCSM (3). Foram identificados 16 compostos voláteis, sendo os majoritários o sesquiterpeno z-cariofileno (45,40%), o álcool octeno-3-ol (19,73%) e o sesquiterpeno cis-muuroala-4(14),5-dieno (5,86%). Os compostos apresentaram potencial para atividade hepatoprotetora e antiulcerativa, o que reforça o uso tradicional da espécie. z-Cariofileno apresenta potencial contra o câncer, por meio de atividade agonista de apoptose, inibição da expressão de MMP-9 e NOS2 e aumento da expressão de TP53. Além disso, o potencial de ambos sesquiterpenos para inibição de NF-κB e da síntese de prostaglandinas sugere ação em doenças inflamatórias. Octeno-3-ol apresenta potencial para o tratamento de doenças cardiovasculares por meio de vasoproteção, vasodilatação, inibição do receptor beta-adrenérgico e anti-hipercolesterolemia. Os compostos não foram classificados como tóxicos em relação à mutagenicidade, cardiotoxicidade e hepatotoxicidade, contudo apresentaram potencial para sensibilização cutânea. As indicações dos potenciais de atividade dos compostos majoritários de *P. neochilus* cultivada em Goiânia proporciona subsídios para estudos biológicos mais aprofundados e para ampliar as aplicações terapêuticas da espécie, além de qualificar informações pertinentes para o seu uso racional.

1. Rice et al., South African Journal of Botany, 2011, 77, 947–959.
2. Lagunin et al., Bioinformatics, 16, 2000, 747–748.
3. Pires et al., Journal of Medicinal Chemistry, 58, 2015, 4066–4072.

Agradecimentos: FAPEG, CAPES, CNPq.