

ANALISE INTEGRATIVA POR FARMACOLOGIA DE REDES DO POTENCIAL NEUROIMUNOMODULADOR DE FICUS MÁXIMA NA ESCLEROSE MÚLTIPLA

Silva JM, Silva ALCFF, Almeida-Junior ,S

Discentes Faculdade Atenas de Passos - MG; Docente Faculdade de Medicina, Universidade

Atenas de Passos

jujuba-mara@hotmail.com

Introdução: A esclerose múltipla [1] é uma doença autoimune crônica do sistema nervoso central, caracterizada por inflamação, desmielinização e neurodegeneração progressiva. Nesse contexto, produtos naturais têm emergido como fontes promissoras de compostos bioativos com potencial terapêutico. *Ficus máxima* [2], espécie nativa do Brasil, destaca-se por suas propriedades farmacológicas ainda pouco exploradas. **Objetivo:** Avaliar o potencial neuroimunomodulador de compostos de *Ficus maxima* por meio de farmacologia de redes e ancoragem molecular, comparando seus efeitos com o fármaco cladribina. **Metodologia:** Foi conduzido um estudo *in silico* integrando dados de diferentes plataformas. As estruturas químicas do escopoletina e da cladribina foram obtidas do PubChem; genes associados à esclerose múltipla foram identificados no GeneCards; e os alvos moleculares preditos foram determinados pelo SwissTargetPrediction. A interseção dos dados foi realizada no Venny 2.0. A rede de interação proteína-proteína (PPI) foi construída no STRING e analisada no Cytoscape para identificação de genes centrais. A validação foi realizada por ancoragem molécula por do software CB-DOCK2. **Resultados:** A escopoletina apresentou 101 alvos preditos, frente a 17.064 genes relacionados a esclerose múltipla, observados no Genecard, com 0,5% de interseção entre os dados pelo diagrama de vennon. A análise da rede de interação proteína-proteína (PPI) revelou um cluster altamente conectado composto por dez alvos principais: EGFR, AKT1, SRC, ERBB2, MET, ESR1, IGF1R, PDGFRB, PTGS2 e KDR. Dentre esses, o EGFR destacou-se como nó central da rede, apresentando elevado grau de conectividade e interações diretas com múltiplos mediadores-chave envolvidos em proliferação celular, sobrevivência, inflamação e sinalização neuroimune. Nos estudos de ancoragem molecular, o composto escopoletina apresentou afinidade de ligação de $-6,1$ kcal/mol, valor comparável ao da cladribina, sugerindo potencial interação estável com o alvo analisado. **Conclusão:** *Ficus maxima* demonstrou relevante potencial neuroimunomodulador, com destaque para a interação com o receptor EGFR. Os achados indicam que seus compostos bioativos podem representar candidatos promissores no desenvolvimento de novas abordagens terapêuticas para esclerose múltipla, com possível redução de custos e ampliação das opções farmacológicas.

Palavra-chave: Esclerose Múltipla; *Ficus maxima*; Farmacologia em Rede; Escopoletina; EGFR.

Referências bibliográficas:

1. Hochsprung A, Escudero-Urbe S, Ibáñez-Vera AJ, Izquierdo-Ayuso G. Effectiveness of monopolar dielectric transmission of pulsed electromagnetic fields for multiple sclerosis-related pain: a pilot study. *Neurologia (Engl Ed)*. 2021;36(6):433–9. doi:10.1016/j.nrleng.2018.03.003 PubMed PMID: 34238526.
2. Cardoso FC, Carvalho FEA de, Freitas TF de, Rezende B, Coelho MGP, Montes GC, et al. Antinociceptive in vivo activity and chemical profiling by UHPLC-MS/MS of stem bark and leaves extracts of *Ficus maxima* Mill. (Moraceae). *J Ethnopharmacol*. 30 de janeiro de 2025;337(Pt 1):118793. doi:10.1016/j.jep.2024.118793 PubMed PMID: 39251148.