



PALUSTRINA DA EQUISETUM GIGANTEUM COMO MODULADOR MULTITARGET DE
EGFR NA ATEROSCLEROSE EVIDENCIADA POR FARMACOLOGIA DE REDES E
ANCORAGEM MOLECULAR

Ribeiro JPOP¹, Almeida-Junior S²

¹ Discente Faculdade de Medicina, Universidade Estadual de Minas Gerais, ² Laboratório de
Biociências e Saúde, Universidade do Estado de Minas Gerais.

joao.261211443@discente.uemg.br

Introdução: A aterosclerose é uma doença inflamatória crônica e multifatorial [1], caracterizada pelo acúmulo progressivo de lipídios, colesterol e depósitos cálcicos na parede vascular, levando à formação de placas ateromatosas [2]. Esse processo compromete o fluxo sanguíneo e está diretamente associado a eventos cardiovasculares graves [3]. Nesse contexto, compostos naturais têm emergido como fontes promissoras de novas abordagens terapêuticas. A palustrina, um alcaloide presente em *Equisetum giganteum* (cavalinha), tem despertado interesse devido aos seus potenciais propriedades bioativas. **Objetivo:** Avaliar o potencial hipolipemiante da palustrina por meio de abordagens integrativas de farmacologia de redes e ancoragem molecular. **Metodologia:** Os alvos moleculares da palustrina foram preditos utilizando o SwissTargetPrediction, enquanto os genes associados à aterosclerose foram obtidos no GeneCards. A interseção entre os conjuntos foi realizada no Venny 2.1.0. A rede de interação proteína-proteína foi construída no STRING e analisada no Cytoscape para identificação de alvos centrais. As estruturas da palustrina e da rosuvastatina foram obtidas no PubChem, enquanto a proteína alvo foi adquirida no PDB e preparada no Chimera. O principal alvo identificado foi submetido à ancoragem molecular utilizando o CB-Dock2. **Resultados:** A palustrina apresentou 69 alvos moleculares preditos e 6.637 genes associados à aterosclerose, indicando potencial interação com mecanismos-chave da doença. A rede PPI revelou um sistema altamente interconectado, com 69 nós e 279 arestas, evidenciando um grau médio de conectividade de 8,455 e coeficiente de clusterização de 0,508, sugerindo organização funcional robusta. A análise topológica identificou 10 alvos principais, com destaque para o receptor EGFR, uma proteína-chave envolvida na proliferação celular, inflamação vascular e remodelamento da parede arterial. Na ancoragem molecular, a palustrina apresentou afinidade de ligação de $-7,4 \text{ kcal.mol}^{-1}$ com o EGFR, valor superior ao observado para a rosuvastatina ($-6,7 \text{ kcal.mol}^{-1}$). **Conclusão:** A palustrina demonstrou relevante potencial hipolipemiante e antiaterogênico, possivelmente mediado pela modulação da via EGFR. A combinação de abordagem sistêmica (farmacologia de redes) e evidências estruturais (docking) sugere que o composto atua de forma multitarget, configurando-se como um candidato promissor para o desenvolvimento de novas estratégias terapêuticas na aterosclerose.



Palavra-chave: Bioinformática, Cardiologia, Fitoterapia, Produtos naturais, potencial hipolipemiante

Referências bibliográficas:

1. Perrotta I. Atherosclerosis: From Molecular Biology to Therapeutic Perspective. Int J Mol Sci. 22 de março de 2022;23(7):3444. doi:10.3390/ijms23073444 PubMed PMID: 35408804; PubMed Central PMCID: PMC8999049.
2. Jebari-Benslaiman S, Galicia-García U, Larrea-Sebal A, Olaetxea JR, Alloza I, Vandenbroeck K, et al. Pathophysiology of Atherosclerosis. Int J Mol Sci. 20 de março de 2022;23(6):3346. doi:10.3390/ijms23063346 PubMed PMID: 35328769; PubMed Central PMCID: PMC8954705.
3. Meng H, Ruan J, Yan Z, Chen Y, Liu J, Li X, et al. New Progress in Early Diagnosis of Atherosclerosis. International Journal of Molecular Sciences. janeiro de 2022;23(16):8939. doi:10.3390/ijms23168939