



POTENCIAL TERAPÊUTICO DA RUTINA NA ENDOMETRIOSE: UMA ABORDAGEM INTEGRADA DE FARMACOLOGIA EM REDES E ANCORAGEM MOLECULAR

Melo, VV¹; Gonçalves, RVB¹; Almeida- Junior, S²

Gonçalves BFA1, Souza CF1, Junior SA2.

¹Acadêmicos do curso de medicina da Universidade do Estado de Minas Gerais;

²Docente da faculdade de Medicina da Universidade Estadual de Minas Gerais.

Introdução: A endometriose [1] é uma doença inflamatória crônica do sistema reprodutor feminino, caracterizada por crescimento ectópico de tecido endometrial e associada à desregulação de vias de sinalização celular. Nesse contexto, compostos naturais têm emergido como alternativas terapêuticas promissoras. A rutina, um flavonoide presente em espécies como a mangaba (*Hancornia speciosa*) [2], apresenta propriedades anti-inflamatórias e antioxidantes que podem ser relevantes para o manejo da doença. **Objetivo:** Investigar o potencial terapêutico da rutina na endometriose por meio de abordagens de farmacologia em redes e ancoragem molecular, comparando seu desempenho com o fármaco dienogeste. **Metodologia:** Os alvos moleculares da rutina foram preditos utilizando o SwissTargetPrediction, enquanto genes associados à endometriose foram obtidos no GeneCards. A interseção foi realizada no Venny 2.0. A rede de interação proteína-proteína (PPI) foi construída no STRING e analisada no Cytoscape para identificação de alvos centrais. As estruturas moleculares foram obtidas no PubChem, e a proteína-alvo foi preparada no Chimera 1.18, sendo posteriormente submetida à ancoragem molecular no CB-Dock2. **Resultados:** A rutina apresentou 48 alvos preditos, enquanto 3.732 genes relacionados à endometriose foram identificados, com interseção de 1,4%. A rede PPI revelou 53 nós e 347 arestas, com grau médio de 13,1 e coeficiente de clusterização de 0,695. A análise de rede identificou TP53 como o principal hub, altamente conectado a mediadores inflamatórios, hormonais e proliferativos, como TNF, EGFR e ESR1. Esse padrão sugere que a desregulação do p53 na endometriose favorece a evasão da apoptose, a manutenção da inflamação crônica e a ativação de vias proliferativas, contribuindo para a sobrevivência, implantação e progressão das lesões endometrióticas. Na ancoragem molecular, a rutina apresentou afinidade de ligação superior (-8,5 kcal/mol) em comparação ao dienogeste (-6,5 kcal/mol). **Conclusão:** Os achados sugerem que a rutina possui potencial terapêutico relevante na endometriose, possivelmente mediado pela modulação de alvos críticos



como p53. Esses resultados reforçam o papel de compostos naturais como candidatos promissores no desenvolvimento de novas estratégias terapêuticas para a doença.

Palavras-chave: Bioinformática, Fitoterapia, Ginecologia, Saúde da Mulher, P53.

Referências

1. Horne AW, Missmer SA. Pathophysiology, diagnosis, and management of endometriosis. *BMJ*. 14 de novembro de 2022;379:e070750. doi:10.1136/bmj-2022-070750 PubMed PMID: 36375827.
2. Reis VH de OT, Rodrigues BM, Loubet Filho PS, Cazarin CBB, Rafacho BPM, Dos Santos EEF. Biotechnological potential of *Hancornia speciosa* whole tree: A narrative review from composition to health applicability. *Heliyon*. outubro de 2022;8(10):e11018. doi:10.1016/j.heliyon.2022.e11018 PubMed PMID: 36276713; PubMed Central PMCID: PMC9578994.