



## **USO DE MÉTODOS COMPUTACIONAIS PARA A PREDIÇÃO DOS EFEITOS DO COMPOSTO MAJORITÁRIO DO ÓLEO DE *Juniperus virginiana* NA EXPRESSÃO GÊNICA HUMANA.**

Nathália Vieira Rios, discente de graduação em Farmácia, Universidade Federal do Pampa, Campus Uruguaiiana

Gabriela Cristiane Mendes Gomes, discente de graduação em Farmácia, Universidade Federal do Pampa, Campus Uruguaiiana

Êmily Clori Sotelo, discente de graduação em Farmácia, Universidade Federal do Pampa, Campus Uruguaiiana

Dyene Nascimento Campos, discente de graduação em Farmácia, Universidade Federal do Pampa, Campus Uruguaiiana

Taiane Acunha Escobar, discente de pós-graduação do PPGECQVS, Universidade Federal do Pampa, Campus Uruguaiiana

Michel Mansur Machado, docente, Universidade Federal do Pampa

e-mail do autor: nathaliarios.aluno@unipampa.edu.br

*Juniperus virginiana* é uma árvore conífera, perene e aromática, da família Cupressaceae, nativa da América do Norte e amplamente distribuída por todo seu território. Seu óleo essencial é extraído a partir da destilação a vapor feita com pedaços da árvore, como o tronco, o cepo, as raspas e a serragem. É conhecida comumente como Cedro virgínia e vem ganhando destaque no mundo acadêmico pelos seus efeitos ansiolíticos e antimicrobianos, contudo, suas propriedades têm sido exploradas há bastante tempo pela medicina tradicional, onde o mesmo é utilizado para o tratamento de doenças reumáticas, febres, resfriados, gripes, acnes e por seu efeito ansiolítico. Apesar de ser empregado no tratamento de inúmeras patologias pela etnofarmacologia e por seu recente destaque no mundo acadêmico, pouco se sabe sobre o efeito do seu composto majoritário sobre os genes. Sendo assim, este estudo teve como objetivo avaliar de forma quantitativa os genes relacionados ao composto majoritário do óleo de *Juniperus virginiana*, estimando com métodos computacionais seus aspectos nas expressões gênicas. A partir de uma análise previamente realizada por CG-MS (cromatografia gasosa acoplada a espectrometria de massas) foi determinado o composto majoritário do óleo. A forma canônica do composto majoritário, o Cedrol, foi pesquisada na base de dados PubChem (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>) e submetida ao teste computacional na plataforma Way2Drug utilizando o Módulo DIGEP-PRED (<http://www.way2drug.com/ge/>) e posteriormente a plataforma GeneCards (<https://www.genecards.org/>) foi utilizada para a descrição dos genes encontrados. Essas plataformas investigaram as expressões gênicas, onde o upregulation e downregulation foram considerados com probabilidades acima de 80%. Os resultados mostraram que o Cedrol é capaz de induzir aumento em sete genes, MAP7 (85,5%), NUCB2 (85,4%), BRMS1 (82,8%), ALDOA (83,3%), P2RY14 (81,2%), SFRP1 (83,2%) e FOXO4 (81,3); sendo alguns desses, como o MAP7, BRMS1 e o FOXO4 fundamentais na divisão celular. Além disso, o composto majoritário reduziu a expressão de quatro genes, sendo eles o TPM1 (84,7%), SESN1 (82,4%), COL5A2 (81,6%) e o TMSB15A (81,5%). A redução de determinados genes pode interferir em proteínas relacionadas à replicação, manutenção e reparo do dano ao DNA. Este é o caso do gene SESN1, a Sestrin 1

faz parte de uma família de proteínas induzidas por estresse altamente conservadas que são reguladas por vários estresses, incluindo danos ao DNA, estresse oxidativo e hipóxia. A SESN1 desempenha papel protetor na maioria das condições fisiológicas e patológicas, principalmente por meio da regulação do estresse oxidativo, inflamação, autofagia, estresse do retículo endoplasmático e homeostase metabólica. Essa proteína medeia a inibição do gene p53 no crescimento celular, ativando a proteína quinase, que resulta na inibição da proteína rapamicina. A proteína codificada desempenha um papel importante na defesa antioxidante, pois regenera peroxirredoxinas superoxidadas. De acordo com a literatura, este gene tem efeito cardioprotetor, melhorando a hipertrofia celular por meio da ativação da autofagia e desempenha um papel crítico na regulação dos fibroblastos cardíacos. Entretanto, a redução da Sestrin 1 está relacionada a uma diminuição da resposta celular no dano ao DNA, o que pode levar a doenças como o Carcinoma Adenoescamoso Endometrial e Esclerose Tuberosa 2, como já relatado em estudos científicos. Neste estudo, observamos alterações na expressão gênica causadas pelo composto majoritário do óleo de *Juniperus Virginiana* através de predições computacionais. Conclui-se que a partir dos resultados obtidos, se faz necessário o seguimento deste estudo *in vitro* para validação destas alterações encontradas.

**Agradecimentos:** CNPq, FAPERGS, e UNIPAMPA.

**Palavras-chave:** Cupressaceae; Cromatografia Gasosa; Adenoescamoso; Peroxirredoxinas; Genes.