



XI SEMANA
UNIVERSITÁRIA

Diversidade,
Inclusão e
Transformação Social

INVESTIGAÇÃO IN SILICO E IN VITRO DE VITAFISALINA F COMO POTENCIAL PROTÓTIPO ANTITUMORAL PARA CÂNCER DE PULMÃO

Camila Lima Da Costa¹

Matheus De Sousa Nobre²

Francisca Aniele Moreira Alencar³

Danilo Damasceno Rocha⁴

Francisco Washington Araújo Barros Nepomuceno⁵

RESUMO

INTRODUÇÃO: O câncer de pulmão representa importante problema de saúde pública, figurando entre as neoplasias de maior incidência e mortalidade no mundo. Apesar dos avanços terapêuticos, limitações relacionadas à eficácia, resistência e toxicidade dos tratamentos reforçam a necessidade de novas alternativas farmacológicas. Nesse contexto, Vitafisalina F (VitaF), um vitaesteroide derivado de produto natural com potencial antineoplásico, destaca-se como molécula de interesse para investigação. **OBJETIVO:** Avaliar, por meio de abordagens *in silico* e *in vitro*, a atividade citotóxica da Vitafisalina F (VitaF) como potencial protótipo antitumoral para câncer de pulmão. **METODOLOGIA:** A investigação *in silico* foi realizada nas plataformas SwissADME®, pkCSM, SmartCyp e ProTox-III, para predição de propriedades físico-químicas, farmacocinéticas e parâmetros toxicológicos. Na etapa *in vitro*, foram utilizadas linhagens tumorais (A549 e NCI-H460) e não tumorais (HEK-293T, L929, HaCaT e MRC-5), mantidas em meios RPMI ou DMEM suplementados com 10% de soro fetal bovino e 1% de penicilina/estreptomicina, a 37 °C e 5% de CO₂. A citotoxicidade foi avaliada pelo ensaio de MTT após 72 horas de incubação com VitaF, em diferentes concentrações. A viabilidade celular foi determinada por leitura espectrofotométrica (595 nm) e os valores de CI50 determinados pelo GraphPad Prism 8.0.1. Doxorubicina foi utilizada como controle positivo dos experimentos. **RESULTADOS:** As análises *in silico* indicaram propriedades físico-químicas e farmacocinéticas favoráveis à investigação da VitaF como protótipo farmacológico, destacando-se absorção intestinal humana predita de 100%, lipofilicidade moderada (LogP = 2,83), TPSA de 105,59 Å² e conformidade com as regras de drug-likeness de Lipinski, Veber, Egan e Muegge, com escore de biodisponibilidade de 0,55. A molécula foi predita como substrato da glicoproteína-P e da CYP2D6, tendo o carbono C26 identificado como principal sítio de biotransformação, sem predição de inibição das principais isoformas do citocromo P450. O perfil toxicológico apresentou predições ativas para citotoxicidade (0,83) e imunotoxicidade (0,99), com baixa probabilidade predita de toxicidade hepática, renal, cardíaca e neurológica. Nos ensaios *in vitro*, VitaF apresentou forte atividade citotóxica em todas as linhagens celulares avaliadas com valores de CI50 variando de 0,55 a 4,09 µM. Considerando apenas as linhagens celulares de pulmão, VitaF foi tão potente quanto o controle positivo doxorrubicina, sendo esta mais seletiva para células tumorais. **CONCLUSÃO:** VitaF apresentou perfil citotóxico interessante com destaque para células A549 (CI50 = 2,56 µM), sugerindo a necessidade de otimização estrutural para aumentar sua seletividade para células tumorais pulmonares. Os achados fornecem evidências preliminares para a continuidade das investigações, contribuindo para a ampliação do conhecimento científico em saúde e para a busca de alternativas farmacológicas mais seguras e seletivas, em consonância com os princípios de Diversidade, Inclusão e Transformação Social.

Agência de fomento: PIBIC UNILAB.

Agradecimentos: Agradeço à UNILAB pelo financiamento, por meio do PIBIC, e à UFC, especialmente ao NPDM, pelo apoio institucional e pela infraestrutura disponibilizada para a realização deste estudo.

Palavras-chave: Vitaesteróides; Citotoxicidade; Ensaio de MTT; Atividade anticâncer.

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB), Instituto de Ciências da Saúde, Discente, camilalima8133@gmail.com¹

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB), Instituto de Ciências da Saúde, Discente, sousanbr@gmail.com²

A Universidade Federal do Ceará (UFC), Núcleo de Pesquisa e Desenvolvimento de Medicamentos (NPDM), Discente, aniele.alencar@gmail.com³

A Universidade Federal do Ceará (UFC), Núcleo de Pesquisa e Desenvolvimento de Medicamentos (NPDM), Discente, danilodrocha@yahoo.com.br⁴

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências da Saúde, Docente, barros@unilab.edu.br⁵