**Câncer de mama: avaliação do eugenol como inibidor do receptor de estrogênio**

José Danilo de Sousa Silva¹\*; Thalita Sobral da Silva2

1Centro Universitário Santo Agostinho, Curso de Farmácia. Teresina – PI

2Faculdade do Médio Parnaíba, Curso de Enfermagem. Teresina – PI

\*Autor correspondente: danilosousapl@gmail.com

**Introdução:** O eugenol (4-allyl (-2-metoxifenol)) é caracterizado como um fenilpropanóide volátil encontrado predominantemente no cravo-da-índia, é uma especiaria muito comum na culinária cotidiana indiana. É um ingrediente funcional de inúmeros produtos que têm sido utilizados na indústria farmacêutica, alimentícia e cosmética em concentrações restritas. Seus derivados têm sido usados na medicina como um antisséptico local e anestésico. Estudos relatam que esta substância tem efeitos antioxidantes e propriedades anticâncer, com potencial utilização para o combate ao câncer de mama. A ampla gama de atividades do eugenol inclui também efeitos antimicrobianos, anti-inflamatório e analgésico. **Objetivos:** Avaliar o potencial efeito inibitório do eugenol no receptor estrogênico humano (PDB ID: 3ERT) através da técnica de docagem molecular. **Métodos:** Trata-se de um estudo descritivo, do tipo experimental com uma abordagem quali-quantitativa sobre o tema. Para tanto utilizando-se dos programas BIOVIA Discovery Studio, PyMol, AutoDock Tools 1.5.6 e AutoDock Vina, foram realizadas a modelagem e simulação de ancoragem da estrutura do eugenol no local de ação respectivamente. **Resultados:** Foram demonstradas pontuações de ancoragem similares entre o eugenol (-5.6 kcal/mol) e o tamoxifeno (-5.7 kcal/mol), um modulador seletivo do receptor de estrogênico. Tais valores evidenciam que ambas as estruturas moleculares (eugenol e tamoxifeno) têm afinidade semelhante em relação a ligação no receptor de estrogênio. É importante ressaltar que as interações entre os resíduos de drogas e aminoácidos é principalmente do tipo eletrostática e Van der Waals. Em relação às interações com resíduos de aminoácidos, foi possível perceber que a estrutura molecular do eugenol apresentou ligações com LEU391, LEU346, LEU347, LEU428, ALA350, ILE424, MET343 e MET388. A estrutura molecular do tamoxifeno por sua vez, apresentou interações com LEU391, LEU387, LEU384, LEU346, ALA350, GLY521, GLY420 e ILE424. **Conclusão:** O estudo de acoplamento molecular revela que o eugenol encaixou no local de ligação devido a altas interações eletrostáticas, pontes de hidrogênio, carbono-hidrogênio, pi-sulfur, alquila e pi-alquila, com uma pontuação de ancoragem semelhante a estrutura molecular do tamoxifeno. No entanto, é possível estabelecer que se faz necessário a realização de testes *in vitro* e *in vivo,* para que possivelmente corroborem com estes achados.

**Palavras-chave:** Simulação de Acoplamento Molecular; Uso de Medicamentos; Conformação Molecular.

**REFERÊNCIAS:**

SILVA, J. D. S. *et al*. In silico evaluation of the inhibitory effect of antiretrovirals Atazanavir and Darunavir on the main protease of SARS-CoV-2: docking studies and molecular dynamics. **Research, Society and Development**, v. 9, n. 8, p. e826986562-e826986562, 2020.

MOHAMMADI, N. S. *et al*. Pharmacological and Toxicological Properties of Eugenol. **Turkish journal of pharmaceutical sciences**, v. 14*,* n. 2, p. 201–206, 2017.

TROTT, O. & OLSON, A. J. AutoDock Vina: Improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization, and multithreading. **Journal of Computational Chemistry**, v. 32, p. 455-61, 2009.