



MICROBIOLOGIA:

Avanços através dos séculos e constante atualizações tecnológicas

Daniela Reis Joaquim de Freitas
(ORGANIZADORA)

**Atena**
Editora
Ano 2021



MICROBIOLOGIA:

Avanços através dos séculos e constante atualizações tecnológicas

Daniela Reis Joaquim de Freitas
(ORGANIZADORA)

**Atena**
Editora
Ano 2021

Editora chefe

Profª Drª Antonella Carvalho de Oliveira

Editora executiva

Natalia Oliveira

Assistente editorial

Flávia Roberta Barão

Bibliotecária

Janaina Ramos

Projeto gráfico

Camila Alves de Cremo

Daphynny Pamplona

Gabriel Motomu Teshima

Luiza Alves Batista

Natália Sandrini de Azevedo

Imagens da capa

iStock

Edição de arte

Luiza Alves Batista

2021 by Atena Editora

Copyright © Atena Editora

Copyright do texto © 2021 Os autores

Copyright da edição © 2021 Atena Editora

Direitos para esta edição cedidos à Atena Editora pelos autores.

Open access publication by Atena Editora



Todo o conteúdo deste livro está licenciado sob uma Licença de Atribuição *Creative Commons*. Atribuição-Não-Comercial-NãoDerivativos 4.0 Internacional (CC BY-NC-ND 4.0).

O conteúdo dos artigos e seus dados em sua forma, correção e confiabilidade são de responsabilidade exclusiva dos autores, inclusive não representam necessariamente a posição oficial da Atena Editora. Permitido o *download* da obra e o compartilhamento desde que sejam atribuídos créditos aos autores, mas sem a possibilidade de alterá-la de nenhuma forma ou utilizá-la para fins comerciais.

Todos os manuscritos foram previamente submetidos à avaliação cega pelos pares, membros do Conselho Editorial desta Editora, tendo sido aprovados para a publicação com base em critérios de neutralidade e imparcialidade acadêmica.

A Atena Editora é comprometida em garantir a integridade editorial em todas as etapas do processo de publicação, evitando plágio, dados ou resultados fraudulentos e impedindo que interesses financeiros comprometam os padrões éticos da publicação. Situações suspeitas de má conduta científica serão investigadas sob o mais alto padrão de rigor acadêmico e ético.

Conselho Editorial**Ciências Biológicas e da Saúde**

Prof. Dr. André Ribeiro da Silva – Universidade de Brasília

Profª Drª Anelise Levay Murari – Universidade Federal de Pelotas

Prof. Dr. Benedito Rodrigues da Silva Neto – Universidade Federal de Goiás

Profª Drª Daniela Reis Joaquim de Freitas – Universidade Federal do Piauí

Profª Drª Débora Luana Ribeiro Pessoa – Universidade Federal do Maranhão

Prof. Dr. Douglas Siqueira de Almeida Chaves – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro

Prof. Dr. Edson da Silva – Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri
Profª Drª Elizabeth Cordeiro Fernandes – Faculdade Integrada Medicina
Profª Drª Eleuza Rodrigues Machado – Faculdade Anhanguera de Brasília
Profª Drª Elane Schwinden Prudêncio – Universidade Federal de Santa Catarina
Profª Drª Eysler Gonçalves Maia Brasil – Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira
Prof. Dr. Ferlando Lima Santos – Universidade Federal do Recôncavo da Bahia
Profª Drª Fernanda Miguel de Andrade – Universidade Federal de Pernambuco
Prof. Dr. Fernando Mendes – Instituto Politécnico de Coimbra – Escola Superior de Saúde de Coimbra
Profª Drª Gabriela Vieira do Amaral – Universidade de Vassouras
Prof. Dr. Gianfábio Pimentel Franco – Universidade Federal de Santa Maria
Prof. Dr. Helio Franklin Rodrigues de Almeida – Universidade Federal de Rondônia
Profª Drª Iara Lúcia Tescarollo – Universidade São Francisco
Prof. Dr. Igor Luiz Vieira de Lima Santos – Universidade Federal de Campina Grande
Prof. Dr. Jefferson Thiago Souza – Universidade Estadual do Ceará
Prof. Dr. Jesus Rodrigues Lemos – Universidade Federal do Piauí
Prof. Dr. Jônatas de França Barros – Universidade Federal do Rio Grande do Norte
Prof. Dr. José Max Barbosa de Oliveira Junior – Universidade Federal do Oeste do Pará
Prof. Dr. Luís Paulo Souza e Souza – Universidade Federal do Amazonas
Profª Drª Magnólia de Araújo Campos – Universidade Federal de Campina Grande
Prof. Dr. Marcus Fernando da Silva Praxedes – Universidade Federal do Recôncavo da Bahia
Profª Drª Maria Tatiane Gonçalves Sá – Universidade do Estado do Pará
Profª Drª Mylena Andréa Oliveira Torres – Universidade Ceuma
Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federaci do Rio Grande do Norte
Prof. Dr. Paulo Inada – Universidade Estadual de Maringá
Prof. Dr. Rafael Henrique Silva – Hospital Universitário da Universidade Federal da Grande Dourados
Profª Drª Regiane Luz Carvalho – Centro Universitário das Faculdades Associadas de Ensino
Profª Drª Renata Mendes de Freitas – Universidade Federal de Juiz de Fora
Profª Drª Vanessa da Fontoura Custódio Monteiro – Universidade do Vale do Sapucaí
Profª Drª Vanessa Lima Gonçalves – Universidade Estadual de Ponta Grossa
Profª Drª Vanessa Bordin Viera – Universidade Federal de Campina Grande
Profª Drª Welma Emidio da Silva – Universidade Federal Rural de Pernambuco

Microbiologia: avanços através dos séculos e constante atualizações tecnológicas

Diagramação: Camila Alves de Cremo
Correção: Bruno Oliveira
Indexação: Amanda Kelly da Costa Veiga
Revisão: Os autores
Organizadora: Daniela Reis Joaquim de Freitas

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

M626 Microbiologia: avanços através dos séculos e constante atualizações tecnológicas / Organizadora Daniela Reis Joaquim de Freitas. – Ponta Grossa - PR: Atena, 2021.

Formato: PDF

Requisitos de sistema: Adobe Acrobat Reader

Modo de acesso: World Wide Web

Inclui bibliografia

ISBN 978-65-5983-633-8

DOI: <https://doi.org/10.22533/at.ed.338212311>

1. Microbiologia. I. Freitas, Daniela Reis Joaquim de (Organizadora). II. Título.

CDD 579

Elaborado por Bibliotecária Janaina Ramos – CRB-8/9166

Atena Editora

Ponta Grossa – Paraná – Brasil

Telefone: +55 (42) 3323-5493

www.atenaeditora.com.br

contato@atenaeditora.com.br

DECLARAÇÃO DOS AUTORES

Os autores desta obra: 1. Atestam não possuir qualquer interesse comercial que constitua um conflito de interesses em relação ao artigo científico publicado; 2. Declaram que participaram ativamente da construção dos respectivos manuscritos, preferencialmente na: a) Concepção do estudo, e/ou aquisição de dados, e/ou análise e interpretação de dados; b) Elaboração do artigo ou revisão com vistas a tornar o material intelectualmente relevante; c) Aprovação final do manuscrito para submissão.; 3. Certificam que os artigos científicos publicados estão completamente isentos de dados e/ou resultados fraudulentos; 4. Confirmam a citação e a referência correta de todos os dados e de interpretações de dados de outras pesquisas; 5. Reconhecem terem informado todas as fontes de financiamento recebidas para a consecução da pesquisa; 6. Autorizam a edição da obra, que incluem os registros de ficha catalográfica, ISBN, DOI e demais indexadores, projeto visual e criação de capa, diagramação de miolo, assim como lançamento e divulgação da mesma conforme critérios da Atena Editora.

DECLARAÇÃO DA EDITORA

A Atena Editora declara, para os devidos fins de direito, que: 1. A presente publicação constitui apenas transferência temporária dos direitos autorais, direito sobre a publicação, inclusive não constitui responsabilidade solidária na criação dos manuscritos publicados, nos termos previstos na Lei sobre direitos autorais (Lei 9610/98), no art. 184 do Código Penal e no art. 927 do Código Civil; 2. Autoriza e incentiva os autores a assinarem contratos com repositórios institucionais, com fins exclusivos de divulgação da obra, desde que com o devido reconhecimento de autoria e edição e sem qualquer finalidade comercial; 3. Todos os e-book são *open access*, desta forma não os comercializa em seu site, sites parceiros, plataformas de *e-commerce*, ou qualquer outro meio virtual ou físico, portanto, está isenta de repasses de direitos autorais aos autores; 4. Todos os membros do conselho editorial são doutores e vinculados a instituições de ensino superior públicas, conforme recomendação da CAPES para obtenção do Qualis livro; 5. Não cede, comercializa ou autoriza a utilização dos nomes e e-mails dos autores, bem como nenhum outro dado dos mesmos, para qualquer finalidade que não o escopo da divulgação desta obra.

APRESENTAÇÃO

A Microbiologia é uma das áreas da Ciências Biológicas que mais cresceu nas últimas décadas. Seu emprego na área da indústria alimentícia, farmacêutica, de reciclagem, biotecnológica entre outras tem sido enorme; e a compreensão de quadros patológicos causados por diferentes micro-organismos em humanos, animais e até em plantas tem sido favorecida devido aos avanços tecnológicos na área médica e de diagnóstico laboratorial.

O livro “Microbiologia: Avanços através dos séculos e constantes atualizações tecnológicas” é uma obra atualizada, composta por trabalhos científicos na forma de artigos originais e de revisão, todos relacionados a esta área de conhecimento, que vai desde o cultivo e triagem de micro-organismos a análise da atividade antibacteriana de extratos de plantas, ou atividade de enzimas ou de fermentação de micro-organismos na indústria alimentícia, e até formação de biofilme e atividade antifúngica de diferentes moléculas.

São 9 capítulos nos quais serão discutidos avanços desta área da ciência e serão revistos conceitos importantes dentro da Microbiologia básica, Bacteriologia e Micologia, além de discutir o papel da tecnologia para a obtenção dos resultados encontrados. A discussão destes temas é feita de forma dinâmica e facilitada, com uma linguagem acessível para estudantes e profissionais.

Este livro, assim como todas as publicações da Atena Editora, passou pela revisão de um Comitê de pesquisadores com mestrado e doutorado em programas de pós-graduação renomados no Brasil. O resultado disto é um trabalho de excelente qualidade, atualizado e devidamente revisado por pares que será apresentado a você, nosso leitor.

Boa leitura!


Daniela Reis Joaquim de Freitas

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1..... 1

ANÁLISE DA ATIVIDADE ANTIBACTERIANA DAS FOLHAS E FLORES DA *Turnera subulata* (FLOR DO GUARUJÁ)


Maria Lucidalva Ribeiro de Sousa
Isabela Ribeiro de Albuquerque
Luana Priscilla Roque Moura
Bruna Silva da Rocha
Kelly Cristina da Silva Martins
Janaína da Costa Nogueira
Adriana Dantas Gonzaga de Freitas

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.3382123111>

CAPÍTULO 2..... 11

APLICAÇÃO DE ENZIMAS EM INDÚSTRIAS ALIMENTÍCIAS


Mylena Sales Palma Passos
Adeline Cristina Pereira Rocha
Thiago Machado Pasin
Vivian Machado Benassi

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.3382123112>

CAPÍTULO 3..... 27

AVALIAÇÃO *IN VITRO* DO EXTRATO DA CASCA E POLPA DO TUCUMÃ (*Astrocaryum aculeatum*) FRENTE A BACTÉRIAS PATOGÊNICAS


Maria Lucidalva Ribeiro de Sousa
Isabela Ribeiro de Albuquerque
Luana Priscilla Roque Moura
Bruna Silva da Rocha
Kelly Cristina da Silva Martins
Janaína da Costa Nogueira
Adriana Dantas Gonzaga de Freitas

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.3382123113>

CAPÍTULO 4..... 36

LIPASES: REVISÃO E APLICAÇÃO INDUSTRIAL

Rafaela Lopes da Silveira
Adeline Cristina Pereira Rocha
Vivian Machado Benassi


 <https://doi.org/10.22533/at.ed.3382123114>

CAPÍTULO 5..... 50

AVALIAÇÃO *IN SILICO* DO POTENCIAL ANTIMICROBIANO DO ÓLEO ESSENCIAL FOLIAR DE COLÔNIA (*Alpinia zerumbet*)

Suelen Carneiro de Medeiros
Igor Lima Soares
Gleilton Weyne Passos Sales

Mary Anne Medeiros Bandeira

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.3382123115>

CAPÍTULO 6..... 61

PRINCIPAIS MICRORGANISMOS ENVOLVIDOS NA FERMENTAÇÃO DE ALIMENTOS


Taynara Ellen Romero Batistela

Dâmaris Cristine Landgraf

Daniele Cassiano Feliciano

Sara Mataroli de Godoy

Daniele Sartori

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.3382123116>


CAPÍTULO 7..... 68

QUALIDADE HIGIÊNICO SANITÁRIA E FÍSICO-QUÍMICA DA CASTANHA-DO-BRASIL E SEUS DERIVADOS COMERCIALIZADOS NA CIDADE DE CHAPECÓ - SC

Daniela Varnier

Filomena Marafon

Débora Carneiro Leite

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.3382123117>

CAPÍTULO 8..... 80

APLICACIÓN DE PCR Y MALDITOF EN LA IDENTIFICACIÓN DE LEVADURAS DEL GÉNERO *CANDIDA*


Alejandra Paula Espinosa Taxis

Débora Vázquez Domínguez

David Iván Loaiza Toscuento

Eulogio Valentín Gómez

Teresita Spezzia Mazzocco

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.3382123118>

CAPÍTULO 9..... 93

FORMACIÓN DE BIOPELÍCULAS Y SENSIBILIDAD A ANTIFÚNGICOS DE *Candida albicans*, *Candida tropicalis* Y *Candida glabrata*

Alejandra Paula Espinosa Taxis

Débora Vázquez Domínguez

David Iván Loaiza Toscuento

Teresita Spezzia Mazzocco

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.3382123119>

SOBRE A ORGANIZADORA..... 104

ÍNDICE REMISSIVO..... 105

AVALIAÇÃO IN SILICO DO POTENCIAL ANTIMICROBIANO DO ÓLEO ESSENCIAL FOLIAR DE COLÔNIA (*Alpinia zerumbet*)

Data de aceite: 01/11/2021

Data de submissão: 13/09/2021

Suelen Carneiro de Medeiros

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Ceará, Campus Morada Nova
Morada Nova - Ceará
<http://lattes.cnpq.br/9010177694544049>

Igor Lima Soares

Departamento de Farmácia, Universidade Federal do Ceará
Fortaleza – Ceará
<http://lattes.cnpq.br/3679739459003212>

Gleilton Weyne Passos Sales

Departamento de Análises Clínicas e Toxicológicas, Universidade Federal do Ceará
Fortaleza - Ceará
<http://lattes.cnpq.br/7835870865998265>

Mary Anne Medeiros Bandeira

Departamento de Farmácia, Universidade Federal do Ceará
Fortaleza - Ceará
<http://lattes.cnpq.br/629188701903402>

RESUMO: A espécie *Alpinia zerumbet* (Pers.) B.L. Burtt & R.M. Sm (Zingiberaceae), conhecida popularmente como colônia, é uma erva aromática medicinal e ornamental, apresentando promissora aplicação para as atividades ansiolítica, antidepressiva, antioxidante e antiespasmódica. A abordagem *in silico* é um conjunto de técnicas computacionais

possibilitando estimar propriedades farmacocinéticas, farmacodinâmicas e toxicológicas de substâncias químicas, contribuindo para as etapas no desenvolvimento de novos candidatos à fármacos. Com isso, o objetivo do presente estudo é avaliar o potencial farmacocinético do óleo essencial de *A. zerumbet* como insumo fitomedicamentoso antimicrobiano, por meio de técnicas de análise computacional. Para isto, o óleo essencial foi obtido por meio de técnica de arraste à vapor d'água, em extrator do tipo Clevenger a partir das folhas de *A. zerumbet* e os componentes do óleo essencial foram identificados e desenhados separadamente por meio do software ACD/ChemSketch. As moléculas foram analisadas utilizando o *software* PASS Online para se determinar as atividades antiviral, antibacteriana e antifúngica, bem como analisados com a plataforma SwissADME para estimar a possibilidade de absorção intestinal passiva, a permeação de pequenas moléculas através da barreira hematoencefálica e a possibilidade de ligação a glicoproteína P. Conforme evidenciado todas as substâncias apresentam potencial de aplicação contra diferentes tipos de vírus e outros microrganismos como bactérias e fungos. Além disso, os constituintes do óleo essencial de *A. zerumbet* tem maior probabilidade de permearem até os tecidos cerebrais, mas não são potenciais substratos para glicoproteína P. Portanto, de acordo com as análises realizadas através das ferramentas computacionais descritas, o óleo essencial de *A. zerumbet* é um potencial alvo farmacológico por ter apresentado em estudos *in silico* potenciais atividades

antiviral, antibacteriana e antifúngica, podendo ser potencialmente utilizadas em distúrbios neurológicos, visto que os componentes do óleo são capazes de penetrar os tecidos cerebrais, e como quimiossensibilizadores atuando em conjunto com outros fármacos.

PALAVRAS-CHAVE: *Alpinia zerumbet*, Óleo Essencial, Infecções

IN SILICO EVALUATION OF THE ANTIMICROBIAL POTENTIAL OF COLONIA FOLIAR ESSENTIAL OIL (*Alpinia zerumbet*)

ABSTRACT: The species *Alpinia zerumbet* (Pers.) BL Burt & RM Sm (Zingiberaceae), popularly known as colony, is a medicinal and ornamental aromatic herb, presenting promising application for anxiolytic, antidepressant, antioxidant and antispasmodic activities of computational techniques enabling the estimation of pharmacokinetic, pharmacodynamic and toxicological properties of chemical substances, contributing to the steps in the development of new drug candidates. Thus, the aim of the present study is to evaluate the pharmacological potential of *A. zerumbet* essential oil as an antimicrobial phytomedicine, through computational analysis techniques. For this purpose, the essential oil was obtained by means of a water vapor drag technique, in a Clevenger type extractor from the leaves of *A. zerumbet*, and the essential oil components were identified and drawn separately using the ACD/software ChemSketch. Molecules were analyzed using the PASS Online software to determine antiviral, antibacterial and antifungal activities, as well as analyzed with the SwissADME platform to estimate the possibility of passive intestinal absorption, the permeation of small molecules across the blood-brain barrier and the possibility of binding the P-glycoprotein. As shown, all substances have potential application against different types of viruses and other microorganisms such as bacteria and fungi. In addition, the constituents of the essential oil of *A. zerumbet* are more likely to permeate into the brain tissues, but they are not potential substrates for P-glycoprotein. Therefore, according to the analyzes carried out using the computational tools described, the essential oil of *A. zerumbet* is a potential pharmacological target for having presented in in silico potential antiviral, antibacterial and antifungal activities, and can potentially be used in neurological disorders, as that the components of the oil are able to penetrate brain tissue, and as chemosensitizers acting in conjunction with other drugs.

KEYWORDS: *Alpinia zerumbet*, Essential oil, Infections.

1 | INTRODUÇÃO

A espécie *Alpinia zerumbet* (Pers.) B.L. Burt & R.M. Sm (Zingiberaceae), conhecida popularmente como colônia, é uma erva aromática medicinal e ornamental, perene e de até três metros de altura, a qual apresenta folhas estreitas e longas (TESCHKE; XUAN, 2018). O vegetal é oriundo do continente asiático, mas encontra-se distribuído em todas as regiões do Brasil (LORENZI; MATOS, 2008).

As partes aéreas da erva são popularmente utilizadas por comunidades do Nordeste brasileiro na forma de chás por infusão para o manejo de diferentes condições de saúde, como hipertensão arterial, afecções cardíacas, ansiedade, bem como tratamento de

estados febris e gripais (MAGALHÃES; BANDEIRA; MONTEIRO, 2020).

Os estudos pré-clínicos demonstram que derivados vegetais de *A. zerumbet* apresentam promissora aplicação para as atividades ansiolítica, antidepressiva, antioxidante e antiespasmódica (CHAN; WONG; CHAN, 2017). Estudos clínicos apontam evidências para a aplicação dos extratos de colônia como produtos fitoterapêuticos hipotensores, de caráter levemente diurético, enquanto o óleo essencial da espécie foi relatado como um fitoproduto auspicioso para a terapia complementar da fibromialgia (CHAN; WONG; CHAN, 2017).

Os óleos essenciais são derivados vegetais provenientes do metabolismo secundário das plantas, sendo definidos como misturas complexas de substâncias voláteis, de caráter lipofílico e que apresentam usualmente odor característico (MILLEZI et al., 2014). Dentre as potencialidades de aplicação terapêutica dos óleos essenciais, destacam-se as ações antifúngica, antibacteriana, antiviral, anticancerígena, antioxidante, anti-inflamatória, antiespasmódica, ansiolítica, dentre outras (GOYAL et al., 2020).

As investigações que visam a obtenção de substâncias de origem natural com potencial de aplicação farmacêutico incluem diversas etapas como extração, isolamento, caracterização molecular e estudos pré-clínicos e clínicos, as quais consomem tempo considerável, bem como demandam custos significativos (ZHANG et al., 2021). Segundo Akkari et al. (2016) e Finnato (2018), apesar dos investimentos, apenas uma a cada 10.000 moléculas investigadas pela indústria farmacêutica se torna um medicamento comercializável.

A abordagem *in silico* consiste em um conjunto de técnicas informatizadas que possibilita estimar propriedades farmacocinéticas, farmacodinâmicas e toxicológicas de substâncias químicas, contribuindo para as etapas de pesquisa e desenvolvimento de novos candidatos à fármacos (TIAN et al., 2015).

A busca por insumos farmacêuticos ativos utilizando ferramentas computacionais é considerada mais ágil, barata e menos árdua em relação ao emprego dos ensaios convencionais *in vivo* e *in vitro* (WANG et al., 2015; WU et al., 2016). Porém, as análises *in silico* ainda são consideradas complementares e não substituem completamente a necessidade dos modelos pré-clínicos atualmente já consolidados (VICTAL et al., 2014).

Segundo Dhingra et al. (2020) nos últimos 20 anos, registra-se mundialmente o aumento da resistência de microorganismos aos agentes quimioterápicos convencionais, implicando no crescimento no número de óbitos associados a infecções, bem como de custos médicos e tempo de estadia em unidades hospitalares. Porém, observa-se que a proporção de descoberta de novos agentes antimicrobianos de alta eficácia é reduzida em relação ao surgimento de mecanismos de resistência desenvolvidos pelos patógenos (LEWIS, 2013).

Ventola (2015), sugere que a indústria farmacêutica perdeu parte do interesse na produção e desenvolvimento de agentes antimicrobianos, devido a necessidade de altos

investimentos atrelados a um menor retorno financeiro, com base na baixa permanência das drogas no mercado (devido a crescente resistência antimicrobiana) e ao lucro reduzido em relação àquele atingido pela comercialização de outras classes terapêuticas.

Considerando este contexto, o objetivo do presente estudo é avaliar o potencial farmacológico do óleo essencial de *A. zerumbet* como insumo fitomedicamentoso antimicrobiano, por meio de técnicas de análise computacional.

2 | MATERIAIS E MÉTODOS

2.1 Material Vegetal

As partes foliares frescas (1290 gramas) da espécie *A. zerumbet* foram obtidas no Horto de Plantas Medicinais Professor Francisco José de Abreu Matos (HPMAM) (3°44'44.9"S 38°34'39.2"W) localizado no Campus do Pici da Universidade Federal do Ceará (UFC), Fortaleza – Ceará. A confirmação da identidade botânica do vegetal foi realizada no Herbário Prisco Bezerra (EAC) do Departamento de Biologia da UFC, onde foi depositada uma exsicata registrada sob a codificação EAC-56851.

2.2 Extração e Caracterização Fitoquímica do Óleo Essencial

O óleo essencial foi obtido por meio de técnica de arraste à vapor d'água, em extrator do tipo Clevenger a partir das folhas frescas da *A. zerumbet*, conforme descrito por Craveiro (1981), com modificações. Em seguida, o óleo essencial de *A. zerumbet* coletado foi pesado com vistas ao cálculo de rendimento (p/p) e armazenado em temperatura de -20°C.

Os constituintes do óleo essencial foram analisados no Parque de Desenvolvimento Tecnológico da (PADETEC) da UFC por meio de Cromatografia Gasosa acoplada a Espectrometria de Massas (CG/EM), utilizando aparelho SHIMADZU, CG/EM-QP 2010. Os componentes do óleo essencial de *A. zerumbet* foram identificados por meio de espectros de massas disponíveis em bancos de dados (NIS21 e NIS107) e pela comparação dos índices de retenção obtidos experimentalmente com os disponíveis na literatura (ADAMS, 2007).

2.3 Desenho de fitoconstituintes para análises *in silico*

Os constituintes químicos identificados por CG/EM referentes ao óleo essencial de *A. zerumbet* foram desenhados separadamente por meio do software ACD/ChemSketch (Freeware) versão 2019.2.2, e os arquivos referentes a cada molécula foram salvos com a extensão .mol. Cada um dos fitoconstituintes foi otimizado de acordo com parâmetros moleculares adaptados de mecânica clássica (SANTOS et al., 2018). ~

2.4 Avaliação do potencial farmacológico dos fitoconstituintes identificados

Os arquivos a extensão .mol previamente gerados foram inseridos através da opção “Get Prediction” do servidor online gratuito PASS Online (<http://www.pharmaexpert.ru/passonline>). O software fornece os resultados da análise na forma de dois índices principais: “Pa” (probabilidade de uma substância ser biologicamente ativa) e “Pi” (probabilidade de uma substância não ser biologicamente ativa) (FILIMOV et al., 2014).

Os índices Pa e Pi foram calculados automaticamente para todas as atividades biológicas disponíveis na ferramenta. Entretanto, após a obtenção dos resultados, foram selecionadas as ações biológicas de relevante caráter antimicrobiano, classificadas e organizadas em três grupos principais, a saber: antiviral (anti-Influenza, anti-Picornavírus, anti-Rinovírus, anti-Herpes, anti-Citomegalovírus (CMV) e inibidora da protease 3C-like), antibacteriana (antibacteriana, antimicobacteriana, inibidora da beta-lactamase e inibidora da lisostafina) e antifúngica (antifúngica, inibidora de esqualeno epoxidase, inibidora da 1,3-beta-glucano sintase, inibidora da quitina sintase e inibidora da lanosterol 14 alfa-desmetilase).

2.5 Predição de absorção intestinal e penetração cerebral por meio de Modelo BOILED-EGG

Os arquivos na extensão .mol foram submetidos a análise por meio da ferramenta BOILED-Egg (Brain Or IntestinaL EstimateD Permeation Predictive Model), disponível na plataforma online gratuita SwissADME (<http://www.swissadme.ch/>), o qual permite estimar a absorção intestinal passiva (HIA) e a permeação de pequenas moléculas através da barreira hematoencefálica (BBB) (DAINA; MICHIELIN; ZOETE, 2017). Além disso, a ferramenta possibilita prever se um composto se trata ou não de um substrato da glicoproteína de permeabilidade (P-gp). A predição é executada por meio de cálculos de correlação entre os valores de Coeficiente de Partição de Wildman (WLOGP) e Área de Superfície Polar Topológica (tPSA) de cada uma das substâncias (DAINA; ZOETE, 2016).

O gráfico BOILED-Egg foi elaborado para o óleo essencial, considerando todos os compostos identificados no registro cromatográfico da amostra.

3 | RESULTADOS E DISCUSSÃO

As tabelas 1 a 3 discriminam os valores de Pa e Pi relativos à atividade antiviral e antibacteriana e antifúngica de todos os fitoconstituintes do óleo essencial analisado. Conforme evidenciado todas as substâncias apresentam potencial de aplicação contra diferentes tipos de vírus e outros microrganismos.

Substância	Influenza		Picornavírus		Rinovírus		Herpes		CMV		3C-like protease	
	Pa	Pi	Pa	Pi	Pa	Pi	Pa	Pi	Pa	Pi	Pa	Pi
Alfa-pineno	0,432	0,037	0,443	0,08	0,3	0,253	0,348	0,061	0,254	0,072	0,236	0,098
Cineol	0,269	0,113	0,483	0,058	0,322	0,209	0,319	0,078	0,29	0,035	0,216	0,138
4-terpineol	0,264	0,117	0,385	0,123	0,496	0,026	0,347	0,062	0,233	0,104	0	0
Timol	0,454	0,031	0,371	0,136	0,451	0,048	0,366	0,052	0,267	0,056	0,26	0,061
Nerolidol	0,233	0,152	0,352	0,156	0,765	0,001	0,394	0,038	0,566	0,002	0	0
Óxido de Cariofileno	0	0	0	0	0,451	0,048	0,205	0,171	0	0	0	0
Elemol	0	0	0	0	0,336	0,184	0,385	0,042	0,215	0,143	0,221	0,128
Salicilato de Benzila	0,444	0,034	0,486	0,057	0,409	0,082	0,381	0,044	0,319	0,02	0,39	0,004
Astratone	0,386	0,051	0,541	0,035	0,339	0,177	0,384	0,043	0,298	0,03	0,311	0,019

Tabela 1. Avaliação do potencial antiviral dos fitoconstituintes do óleo essencial de *A. zerumbet*

Fonte: Autores.

Substância	Antibacteriano		Antimicobacteriana		Beta lactamase inhibitor	
	Pa	Pi	Pa	Pi	Pa	Pi
Alfa-pineno	0,326	0,051	0,189	0,188	0,101	0,094
Cineol	0,298	0,061	0	0	0,099	0,098
4-terpineol	0,328	0,05	0,233	0,136	0	0
Timol	0,336	0,047	0,473	0,023	0,133	0,054
Nerolidol	0,462	0,02	0,296	0,083	0	0
Óxido de Cariofileno	0,532	0,014	0,251	0,119	0	0
Elemol	0,474	0,019	0,434	0,031	0	0
Salicilato de Benzila	0,339	0,046	0,471	0,024	0,255	0,009
Astratone	0,35	0,043	0,249	0,12	0,151	0,039

Tabela 2. Avaliação do potencial antibacteriano dos fitoconstituintes do óleo essencial de *A. zerumbet*

Fonte: Autores.

Substância	Antifungal		Squalene epoxidase inhibitor		1,3-Beta-glucan synthase inhibitor		Chitin synthase inhibitor		Lanosterol 14 alpha demethylase inhibitor	
	Pa	Pi	Pa	Pi	Pa	Pi	Pa	Pi	Pa	Pi
Alfa-pineno	0,439	0,042	0,106	0,068	0,043	0,043	0,138	0,078	0	0
Cineol	0,214	0,128	0,101	0,078	0	0	0,126	0,096	0,125	0,063
4-terpineol	0,107	0,047	0,097	0,089	0,045	0,041	0	0	0,123	0,067
Timol	0,464	0,037	0,151	0,013	0,05	0,034	0,164	0,051	0,14	0,04
Nerolidol	0,635	0,015	0,188	0,004	0,051	0,033	0	0	0,134	0,047
Óxido de Cariofileno	0,647	0,014	0	0	0,084	0,016	0	0	0	0
Elemol	0,617	0,017	0	0	0,06	0,026	0	0	0,122	0,07
Salicilato de Benzila	0,379	0,055	0,173	0,005	0	0	0,231	0,022	0,175	0,015
Astratone	0,362	0,059	0,151	0,013	0	0	0,232	0,021	0,149	0,031

Tabela 3. Avaliação do potencial antifúngico dos fitoconstituintes do óleo essencial de *A. zerumbet*

Fonte: Autores.

Quando o P_a é maior que 0,7, existe alta probabilidade da molécula em análise apresentar ação biológica experimentalmente, porém a referida molécula pode se tratar de um análogo estrutural próximos de fármacos tradicionais. Se o valor de P_a for situado entre 0,7 e 0,5, existem menores chances de se detectar atividade biológica durante os ensaios pré-clínicos, mas maior chance de se tratar de uma molécula protótipo para uma nova classe de drogas. Para moléculas com P_a inferior a 0,5, e P_a superior ao valor de P_i , existem baixas chances da substância apresentar ação biológica mas se a previsão for confirmada, o composto encontrado poderá ser um composto protótipo para uma nova classe química para a atividade biológica em estudo. (FILIMONOV *et al.*, 2014).

Como apresentado nas tabelas, vários podem ser os alvos de atividade relacionados aos constituintes do óleo essencial de *A. zerumbet*, como a 3C-like protease (3CLpro), que sé uma proteína essencial para a replicação de diferentes tipos de coronavírus, incluindo o SARS-CoV-2, sendo considerada um importante alvo em investigações de agentes terapêuticos para a COVID-19 (LIU *et al.*, 2020).

Além disso, outros alvos são enzimas bacterianas e fúngicas essenciais nos mecanismos de resistência, tais como as beta-lactamases, que catalisam a quebra do anel beta-lactâmico presente nas estruturas de diversos antimicrobianos como penicilinas, cefalosporinas e carbapenêmicos (WATKINS *et al.*, 2013). Já relacionado a possível atividade antifúngica, alvos potenciais são moléculas relacionadas a manutenção das estruturas de membrana e parede celular, tais como Esqualeno epoxidase e lanosterol 14 α -demetilase, enzimas estas necessárias ao metabolismo do ergosterol. Outros alvos são 1,3-beta-glucano sintase e a quitina sintase, importantes constituintes das paredes celulares fúngicas, sendo esta última não encontrada em fungos e animais, o que acaba se tornando um alvo promissor para o desenvolvimento de fármacos de ação antifúngica (CHAUDHARY; TUPE; DESHPANDE, 2013).

Com relação a predição de absorção intestinal e penetração cerebral por meio de Modelo BOILED-EGG para os constituintes do óleo essencial de *A. zerumbet*.

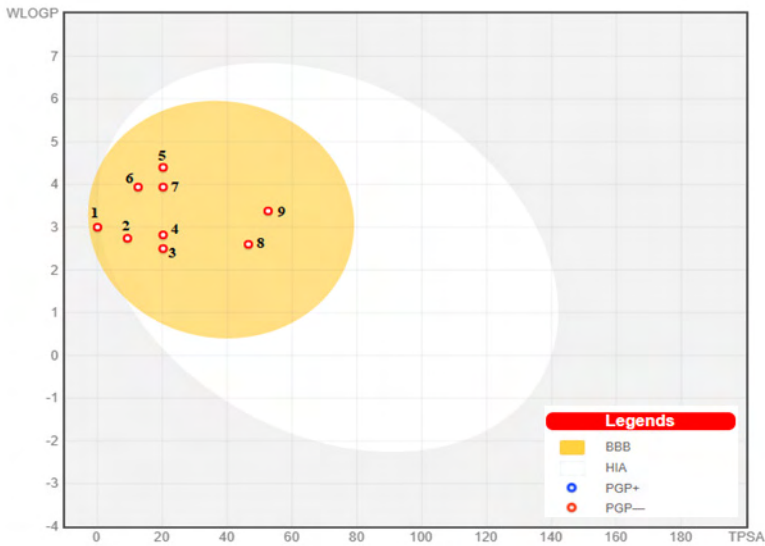


Figura 1. Modelo BOILED-Egg para fitoconstituintes do óleo essencial de *A. zerumbet*

Fonte: Autores

As substâncias que aparecem na zona branca são as que possuem maior probabilidade de serem absorvidas pelo trato gastrointestinal, enquanto as que aparecem sob a zona amarela são as moléculas que possuem maior probabilidade de permear-se até o tecido cerebral. Moléculas plotadas na área cinza possuem dificuldades de absorção (DAINA; ZOETE, 2016). Como apresentado na figura 1, os constituintes do óleo essencial de *A. zerumbet* tem maior probabilidade de permearem até os tecidos cerebrais, o que pode justificar a potencial atividade em distúrbios neurológicos presente nos óleos de plantas do gênero *Alpinia* (GHOSH & RANGAN, 2013).

Apesar de óleos essenciais serem capazes de alterar estrutura das membranas e conseqüentemente se ligarem a glicoproteína P (gp-P), ocasionando o processo de resistência a muitos fármacos, o óleo essencial de *A. zerumbet* não é capaz de se ligar a gp-P (pontos em vermelho na figura 1), de acordo com a predição realizada, o que pode vir a ser um ponto de interessante abordagem visto que fármacos que se ligam a gp-P são chamados quimiossensibilizadores, pois estes podem ser utilizados em conjunto a outros medicamentos com baixa especificidade de ligação a gp-P, fazendo com que estes permaneçam no interior das células quando o quimiossensibilizador é retirado da célula pelo transportador (KOSMO, 2017).

4 | CONCLUSÃO

Portanto, de acordo com as análises realizadas através das ferramentas

computacionais descritas, o óleo essencial de *Alpinia zerumbet* é um potencial alvo farmacológico por ter apresentado em estudos *in sílico* potenciais atividades antiviral, antibacteriana e antifúngica, podendo ser potencialmente utilizadas em desordens neurológicas, visto que os componentes do óleo são capazes de penetrar os tecidos cerebrais, e como quimiossensibilizadores atuando em conjunto com outros fármacos.

REFERÊNCIAS

ADAMS, R. P. **Identification of essential oil components by gas chromatography/mass spectrometry**. Allured Pub Corp. Ed. 4, 2007. 804p.

AKKARI, Alessandra Cristina Santos *et al.* Inovação tecnológica na indústria farmacêutica: diferenças entre a Europa, os EUA e os países farmaemergentes. **Gestão & Produção**, [S.L.], v. 23, n. 2, p. 365-380, 14 jun. 2016.

CARDOSO, Rebeca Sales. **Desenvolvimento de técnicas farmacêuticas para obtenção da droga vegetal a partir das folhas de erva-cidreira (*Lippia alba* (Mill.) NE Brown) quimiotipo II**. 2016. Dissertação (Mestrado em Ciências Farmacêuticas) – Departamento de Farmácia, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza- CE, 2016.

CHAN, Eric Wei Chiang; WONG, Siu Kuin; CHAN, Hung Tuck. *Alpinia zerumbet*, a ginger plant with a multitude of medicinal properties: an update on its research findings. **Journal Of Chinese Pharmaceutical Sciences**, [S.L.], v. 26, n. 11, p. 775-788, 30 nov. 2017. *Journal of Chinese Pharmaceutical Sciences*.

CHAUDHARY, Preeti M.; TUPE, Santosh G.; DESHPANDE, Mukund V.. Chitin Synthase Inhibitors as Antifungal Agents. **Mini Reviews In Medicinal Chemistry**, [S.L.], v. 13, n. 2, p. 222-236, 1 fev. 2013.

CRAVEIRO, A. A. *et al.* **Óleos essenciais de plantas do Nordeste**. Fortaleza: UFC, 1981.

DAINA, A.; MICHIELIN, O.; ZOETE, V. SwissADME: a free web tool to evaluate pharmacokinetics, drug-likeness and medicinal chemistry friendliness of small molecules. **Scientific Reports**, v. 7, p. 42717, 2017.

DAINA, A.; ZOETE, V. A boiled-egg to predict gastrointestinal absorption and brain penetration of small molecules. **ChemMedChem**, v. 11, n. 11, p. 1117, 2016.

DHINGRA, Sameer *et al.* Microbial Resistance Movements: an overview of global public health threats posed by antimicrobial resistance, and how best to counter. **Frontiers In Public Health**, [S.L.], v. 8, n. 1, p. 1-22, 4 nov. 2020.

FILIMONOV, D. A. *et al.* Prediction of the biological activity spectra of organic compounds using the PASS online web resource. **Chemistry of Heterocyclic Compounds**, v. 50, n. 3, p. 444-457, 2014.

FINATTO, Luis Junior. **Aplicabilidade da matriz raci no cenário da unidade de pesquisa clínica do hospital universitário de santa maria**. 2018. 140 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Mestrado Profissional em Pesquisa Clínica, Hospital das Clínicas de Porto Alegre, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2018.

GHOSH, S.; RANGAN, L. **Alpinia: the gold mine of future therapeutics**. 3 *Biotech*, v. 3, n. 3, p. 173–185, 1 jun. 2013.

GOYAL, Megh R. *et al.* **The therapeutic properties of medicinal plants: health-rejuvenating bioactive compounds of native flora**. Burlington: Apple Academic Press, 2020. 360 p.

KOSMO, Daniele de Fatima. **AVALIAÇÃO DA CITOTOXICIDADE DA FASE VAPOR DO ÓLEO ESSENCIAL DE *Jasminum officinale* EM CALU-3 (ADENOCARCINOMA DE PULMÃO) E 3T3 (FIBROBLASTOS)**. 2017. Dissertação (Mestrado em Ciências Biomédicas) – Universidade Estadual de Ponta Grossa, Ponta Grossa, 2017.

LEWIS, Kim. Platforms for antibiotic discovery. **Nature Reviews Drug Discovery**, [S.L.], v. 12, n. 5, p. 371-387, 30 abr. 2013.

LIU, J.; BALASUBRAMANIAN, M.. 1,3-beta-Glucan Synthase: a useful target for antifungal drugs. **Current Drug Target -Infectious Disorders**, [S.L.], v. 1, n. 2, p. 159-169, 1 ago. 2001.

LIU, Yuzhi *et al.* The development of Coronavirus 3C-Like protease (3CLpro) inhibitors from 2010 to 2020. **European Journal Of Medicinal Chemistry**, [S.L.], v. 206, p. 112711, nov. 2020.

LORENZI, H.; MATOS, F.J. A. M. **Plantas Medicinais no Brasil: nativas e exóticas**. 2.ed. Nova Odessa: Instituto Plantarum, 2008. 544p

MAGALHÃES, Karla do Nascimento; BANDEIRA, Mary Anne Medeiros; MONTEIRO, Mirian Parente. **Plantas medicinais da caatinga do Nordeste brasileiro: etnofarmacopeia do professor francisco José de abreu matos**. Fortaleza: Imprensa Universitária da Universidade Federal do Ceará, 2020. 253 p.

MILLEZI, A. F. *et al.* Caracterização química e atividade antibacteriana de óleos essenciais de plantas condimentares e medicinais contra *Staphylococcus aureus* e *Escherichia coli*. **Revista Brasileira de Plantas Medicinais**, [S.L.], v. 16, n. 1, p. 18-24, mar. 2014.

MONK, Brian C. *et al.* Fungal Lanosterol 14 α -demethylase: a target for next-generation antifungal design. **Biochimica Et Biophysica Acta (Bba) - Proteins And Proteomics**, [S.L.], v. 1868, n. 3, p. 1-19, mar. 2020.

PADYANA, Anil K. *et al.* Structure and inhibition mechanism of the catalytic domain of human squalene epoxidase. **Nature Communications**, [S.L.], v. 10, n. 1, p. 1-10, 9 jan. 2019.

TESCHKE, Rolf; XUAN, Tran. Viewpoint: a contributory role of shell ginger (*alpinia zerumbet*) for human longevity in okinawa, Japan?. **Nutrients**, [S.L.], v. 10, n. 2, p. 166, 31 jan. 2018.

TIAN, Sheng *et al.* The application of in silico drug-likeness predictions in pharmaceutical research. **Advanced Drug Delivery Reviews**, [S.L.], v. 86, p. 2-10, jun. 2015.

VENTOLA, C. L. The antibiotic resistance crisis: causes and threats. **Pharmacy and Therapeutics Journal**, v. 40, p. 277–283, 2015.

VICTAL, J. C. *et al.* Métodos alternativos in vitro e in silico: métodos auxiliares e substitutivos à experimentação animal. **RevInter**, v. 7, n. 2, p. 57-36, 2014.

WANG, Yulan *et al.* In silico ADME/T modelling for rational drug design. **Quarterly Reviews Of Biophysics**, [S.L.], v. 48, n. 4, p. 488-515, 2 set. 2015.

WATKINS, Richard R. *et al.* Novel β -lactamase inhibitors: a therapeutic hope against the scourge of multidrug resistance. **Frontiers In Microbiology**, [S.L.], v. 4, n. 24, p. 1-8, dez. 2013.

WU, Zengrui *et al.* In silico prediction of chemical mechanism of action via an improved network-based inference method. **British Journal Of Pharmacology**, [S.L.], v. 173, n. 23, p. 3372-3385, 1 nov. 2016.

ZHANG, Ruihan *et al.* Machine learning approaches for elucidating the biological effects of natural products. **Natural Product Reports**, [S.L.], v. 38, n. 2, p. 346-361, 2021.

ÍNDICE REMISSIVO

A

- Ação antibacteriana 3, 29
Alimentos fermentados 61, 62, 63, 64
Alpinia zerumbet 50, 51, 58, 59
Antifúngicos 82, 93, 97, 98, 99, 100, 101, 103
Application 11, 12, 24, 36, 46, 48, 51, 59, 81
Astrocaryum aculeatum 9, 27, 28, 29, 34
Avaliação físico-química 68, 73, 75
Avaliação microbiológica 68, 70, 71, 73, 74, 77, 79

B

- Barras de cereais 68, 71, 73, 74, 75, 76, 77, 78
Biocatalisadores 11, 13, 14, 48
Biopelículas 93, 95, 96, 97, 98, 101
Biotechnology 24, 36, 46, 47, 48, 66, 90

C

- Candida albicans* 32, 81, 93, 94, 100, 102, 103
Candida glabrata 81, 93, 94, 95, 101, 102
Candida spp. 80, 81, 83, 93, 94, 96, 101
Candida tropicalis 81, 93, 94, 95, 100, 101, 103
Castanha-do-Brasil 68, 69, 70, 71, 74, 76, 77, 78, 79

E

- Enzimas 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 22, 23, 24, 25, 26, 32, 36, 37, 38, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 48, 56, 63, 95, 99
Enzymes 11, 12, 15, 24, 26, 34, 36, 47, 48
Escherichia coli 1, 2, 27, 28, 29, 59, 68, 69, 70, 71, 73, 74
Extratos metanólicos 1, 2, 3, 5, 6, 28, 29, 31, 33

F

- Fungos 4, 18, 21, 24, 25, 37, 46, 50, 56, 61, 64, 71, 75, 78

I

- Indústria alimentícia 11, 12, 18, 20, 21, 23, 42
Infecções 3, 20, 51, 52, 104

K

Klebsiella pneumoniae 1, 2, 27, 28, 29

L

Linhagens de bactérias 61

Lipase 16, 25, 36, 40, 41, 45, 46, 47, 48

M

MALDITOF 80, 81, 83, 84, 85, 86, 89

Microrganismos 3, 5, 6, 8, 14, 18, 20, 21, 23, 24, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 34, 37, 44, 50, 54, 61, 62, 63, 64, 70, 71, 75, 77, 84

O

Óleo essencial 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59

P

Potencial antimicrobiano 50

Processos industriais 11, 12, 14, 20, 23

Pseudomonas aeruginosa 1, 2, 27, 28, 29, 41

S

Staphylococcus aureus 1, 2, 3, 27, 28, 29, 59, 65

T

Tucumã 9, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34

Turnera subulata 1, 2, 10





MICROBIOLOGIA:

Avanços através dos séculos e constante atualizações tecnológicas

www.atenaeditora.com.br 

contato@atenaeditora.com.br 

[@atenaeditora](https://www.instagram.com/atenaeditora) 

www.facebook.com/atenaeditora.com.br 


Ano 2021

MICROBIOLOGIA:

Avanços através dos séculos e constante atualizações tecnológicas

www.atenaeditora.com.br 

contato@atenaeditora.com.br 

[@atenaeditora](https://www.instagram.com/atenaeditora) 

www.facebook.com/atenaeditora.com.br 

 **Atena**
Editora
Ano 2021