Revista Eletrônica
Acervo Saúde
Electronic Journal Collection Health ISSN 2178-2091

Estudo in silico das propriedades farmacológicas da curcumina: potencial terapêutico, alvos moleculares e perfil farmacocinético e farmacodinâmico

In silico study of the pharmacological properties of curcumin: therapeutic potential, molecular targets, and pharmacokinetic and pharmacodynamic profile

Estudio in silico de las propiedades farmacológicas de la curcumina: potencial terapéutico, blancos moleculares y perfil farmacocinético y farmacodinámico

Stheffany Dias Santos[1], Caroline Amélia Gonçalves[1], Saymon Regis Santana[3], Jeferson Noslen Casarin[2], Karoline Silva Oliveira[1], Bruna Moura Cardoso Sousa[2], Cristina Limeira Leite[1], Andressa Rizzo[3], Isabel Cristina Limeira Leite[1], Domingos Magno Santos Pereira[1].

RESUMO

Objetivo: Realizar análise in silico das propriedades farmacocinéticas e farmacodinâmicas da curcumina, utilizando as plataformas SwissADME e Swiss Target Prediction, com enfoque na sua biodisponibilidade oral, interações enzimáticas e potenciais alvos moleculares. **Métodos:** Foi realizada uma análise in silico utilizando as plataformas SwissADME e Swiss Target Prediction para avaliar as propriedades farmacocinéticas e farmacodinâmicas da curcumina. **Resultados:** Os resultados demonstraram adequada biodisponibilidade oral, alta absorção gastrointestinal, mas baixa permeabilidade pela barreira hematoencefálica e cutânea. Além disso, foi identificada como inibidora das enzimas CYP2C9 e CYP3A4, principais isoformas do citocromo P450 responsáveis pela metabolização de alguns fármacos comercializados, o que implica em possíveis interações medicamentosas. A análise farmacodinâmica revelou interação com 100 proteínas-alvo, sendo 12 com escores máximos de afinidade (score = 10). Entre elas, destacam-se a COX-1, Nrf2, a anidrase carbônica II e o EGFR. As classes funcionais mais representativas foram liases (46,7%), oxidoredutases e quinases (13,3% cada), indicando ação multifacetada sobre vias inflamatórias, oxidativas e de proliferação celular. **Conclusão:** Conclui-se que é promissora para o desenvolvimento de novos fármacos. Contudo, estudos clínicos adicionais são necessários para consolidar sua aplicabilidade em protocolos terapêuticos humanos.

Palavras-chave: Curcuma longa, Curcumina, Farmacocinéticas, Farmacodinâmicas, Propriedades terapêuticas.

ABSTRACT

Objective: To perform an in silico analysis of the pharmacokinetic and pharmacodynamic properties of curcumin using the SwissADME and Swiss Target Prediction platforms, focusing on its oral bioavailability, enzymatic interactions, and potential molecular targets. **Methods:** An in silico analysis was conducted using the SwissADME and Swiss Target Prediction platforms to evaluate the pharmacokinetic and pharmacodynamic properties of curcumin. **Results:** The results showed adequate oral bioavailability, high gastrointestinal absorption, but low permeability across the blood-brain and skin barriers. In addition, curcumin was identified as an inhibitor of the CYP2C9 and CYP3A4 enzymes, the main cytochrome P450 isoforms responsible for metabolizing several marketed drugs, which implies possible drug interactions. Pharmacodynamic analysis revealed interactions with 100 protein targets, with 12 showing maximum affinity scores (score = 10). Among them, COX-1, Nrf2, carbonic anhydrase II, and EGFR stood out. The most

[1] Universidade Ceuma (UNICEUMA), Imperatriz – MA.
[2] Universidade Federal do Maranhão (UFMA), Imperatriz - MA.
[3] Universidade Estadual do Tocantins (UNITINS), Augustinópolis - TO.

SUBMETIDO EM: 11/2025 | **ACEITO EM: 12/2025** | **PUBLICADO EM: 2/2026**

representative functional classes were lyases (46.7%), oxidoreductases, and kinases (13.3% each), indicating a multifaceted action on inflammatory, oxidative, and cell proliferation pathways. **Conclusion:** It is concluded that curcumin is promising for the development of new drugs. However, additional clinical studies are needed to consolidate its applicability in human therapeutic protocols.

Keywords: Curcuma longa, Curcumin, Pharmacokinetics, Pharmacodynamics, Therapeutic properties.

RESUMEN

Objetivo: Realizar un análisis in silico de las propiedades farmacocinéticas y farmacodinámicas de la curcumina utilizando las plataformas SwissADME y Swiss Target Prediction, con énfasis en su biodisponibilidad oral, interacciones enzimáticas y posibles dianas moleculares. **Métodos:** Se realizó un análisis in silico utilizando las plataformas SwissADME y Swiss Target Prediction para evaluar las propiedades farmacocinéticas y farmacodinámicas de la curcumina. **Resultados:** Los resultados demostraron una biodisponibilidad oral adecuada, una alta absorción gastrointestinal, pero una baja permeabilidad a través de la barrera hematoencefálica y cutánea. Además, se identificó a la curcumina como inhibidora de las enzimas CYP2C9 y CYP3A4, las principales isoformas del citocromo P450 responsables del metabolismo de varios fármacos comercializados, lo que implica posibles interacciones medicamentosas. El análisis farmacodinámico reveló interacciones con 100 proteínas diana, de las cuales 12 presentaron puntuaciones máximas de afinidad (score = 10). Entre ellas, se destacaron COX-1, Nrf2, la anhidrasa carbónica II y el EGFR. Las clases funcionales más representativas fueron liasas (46,7%), oxidorreductasas y quinasas (13,3% cada una), lo que indica una acción multifacética sobre las vías inflamatorias, oxidativas y de proliferación celular. **Conclusión:** Se concluye que la curcumina es prometedora para el desarrollo de nuevos fármacos. Sin embargo, se requieren estudios clínicos adicionales para consolidar su aplicabilidad en protocolos terapéuticos humanos.

Palabras clave: Curcuma longa, Curcumina, Farmacocinéticas, Farmacodinámicas, Propiedades terapéuticas.

INTRODUÇÃO

Pertencente a classe de curcuminóides, a curcumina é um composto polifenólico extraído do rizoma da Cúrcuma longa (popularmente conhecida como açafrão-da-terra), planta herbácea perene rizomatosa. É o principal componente ativo da cúrcuma, conhecida também por sua cor amarelo-ouro, é utilizada desde séculos passados na medicina tradicional indiana, onde é conhecida como Ayurveda. O extrato da planta possui diversos efeitos terapêuticos, evidenciados por diversas publicações, como nos artigos de Prasad S e Aggarwal BB (2011), que destacam seu uso tradicional e a transição para aplicações na medicina moderna. Experimentos já demonstraram efeitos tais como regulação da imunidade, antioxidante, anti-inflamatório, antitumoral e anticoagulante, que revelam por meio de revisão sistemática, sua eficácia clínica (ZENG L, et al., 2022).

Drogas de origem vegetal como a curcumina representam importantes meios de tratamentos para doenças, uma vez que são acessíveis para todas as populações, especialmente as mais carentes. A modulação de mecanismos biológicos por drogas vegetais pode afetar positivamente a fisiopatologia de diversos tipos de doenças, atuando tanto de forma profilática quanto para o tratamento farmacológico (TRONCON LE, 2001).

Uma revisão de ensaios clínicos conduzida por Panknin TM, et al. (2023) avaliou estudos envolvendo administração oral de curcumina e revelou resultados consistentes em condições como síndrome metabólica, diabetes tipo 2 e osteoartrite, com 75% dos trabalhos relatando efeitos clínicos positivos, incluindo melhora da resistência insulínica, perfil lipídico, marcadores inflamatórios e dor musculoesquelética. Ademais, os autores destacam que grande parte dos ensaios utilizou formulações com biodisponibilidade aumentada, evidenciando a tentativa de contornar as dificuldades de absorção e metabolismo que limitam sua eficácia clínica.

Em paralelo, a partir da Pesquisa Nacional de Saúde (PNS-2019), foi identificado que 2,6% da população adulta relatou uso de plantas medicinais ou fitoterápicos no último ano, sendo essa prática mais prevalente entre mulheres, idosos e portadores de doenças crônicas, o que evidencia uma demanda crescente por

alternativas terapêuticas de origem natural (CASTILHOS PF, et al., 2023). A curcumina, embora amplamente investigada, apresenta limitações farmacológicas que abrangem obstáculos como sua reduzida solubilidade em água, instabilidade em pH fisiológico e suscetibilidade à extensa biotransformação hepática, fatores que dificultam a manutenção de concentrações terapêuticas adequadas no organismo.

Tais características comprometem a ação prolongada do composto e restringem sua eficácia em ambientes biológicos complexos, exigindo intervenções tecnológicas capazes de melhorar sua estabilidade e desempenho farmacológico. Conforme destacado por Silvestre F, et al. (2023), superar essas barreiras é fundamental para viabilizar aplicações clínicas mais consistentes e favorecer o desenvolvimento de formulações inovadoras que ampliem o potencial terapêutico da curcumina.

Apesar das diversas publicações, muitas pesquisas ainda são necessárias para de fato comprovar o potencial da curcumina para tratar doenças humanas, nesse contexto, estudos pré-clínicos e clínicos são essenciais para responder essas perguntas, no entanto, é importante lembrar que esses experimentos podem trazer sofrimento animal, levantando questões éticas sobre a pesquisa científica (MORTON DB, 2023). Nesse contexto, estudos in sílico com a curcumina são capazes de reduzir o número de animais experimentais, uma vez que são capazes de predizer diversas atividades biológicas e metabólicas de novas drogas (MADDEN JC, et al., 2020).

Cabe destacar que os estudos in silico desempenham papel estratégico na descoberta de fármacos, pois permitem prever propriedades estruturais, biológicas e toxicológicas antes das etapas pré-clínicas, otimizando recursos e aumentando a segurança no desenvolvimento de novas moléculas. A integração dessas abordagens com métodos laboratoriais favorece a seleção eficiente de candidatos promissores. Na indústria farmacêutica, a curcumina tem despertado crescente interesse devido ao seu amplo potencial bioativo, o que impulsiona investigações sobre suas interações moleculares e aprimoramento de formulações, consolidando-se como um composto de relevância significativa em pesquisas contemporâneas. Tais avanços reforçam a importância da modelagem computacional no cenário atual de inovação farmacológica em todo o mundo. (SILVESTRE F, et al., 2023)

Vale ressaltar que o descobrimento de novos fármacos é de extrema importância uma vez que novas doenças estão surgindo e, em muitos casos, elas apresentam resistência/tolerância aos medicamentos já existentes. Portanto, o presente trabalho teve como objetivo realizar estudos farmacocinéticos e farmacodinâmicos in sílico da curcumina através do uso de plataformas online, tais como SwissADME e Swiss Target Prediction.

MÉTODOS

Análise de alvos biológicos

Os possíveis alvos biológicos para as moléculas que foram testadas, foram avaliados através do programa Swiss Target Prediction, disponível online (http.//www.swisstargetprediction.ch/). As análises foram realizadas com base na homologia da droga testada através da comparação com um banco de dados de moléculas já conhecidas, cujos alvos farmacológicos já foram previamente identificados e testados. As substâncias inicialmente foram agrupadas em famílias de moléculas e posteriormente as 12 com maiores probabilidades de ligar-se as drogas testadas, foram listadas. Para calcular a afinidade (força de ligação) dessas moléculas um score de ligação foi desenvolvido, variando entre 1 e 10, sendo que, quanto maior o score, maior a probabilidade da molécula apresentar sítio de ligação para o alvo em questão.

A utilização da plataforma Swiss Target Prediction justifica-se por sua reconhecida precisão na predição de alvos moleculares, fundamentada em ampla base de dados experimental e em métodos robustos de similaridade estrutural. Além de acesso gratuito, o sistema oferece análises rápidas, padronizadas e reprodutíveis, permitindo identificar interações potenciais relevantes para estudos farmacológicos. Dessa forma, sua aplicação no presente trabalho garante confiabilidade metodológica e favorece interpretações consistentes sobre os possíveis mecanismos de ação da curcumina.

Estudo da biodisponibilidade da administração por via oral da curcumina:

Foi utilizado o software Swiss ADME, disponível online (http://www.swissadme.ch/) (DAINA A et al., 2017). Cinco critérios foram avaliados, sendo que, para uma droga apresentar boa disponibilidade oral, ela deve apresentar pelo menos três dos seguintes: 1) Área de superfície polar total (ASPT) <140 A2; 2) Consenso de LogP ≤ 5; 3) Peso molecular <500 daltons; 4) Número de aceptores de ligações de hidrogênio ≤ 10; e 5) Número de doadores de ligações de hidrogênio ≤ 5. (LIPINSKI CA, 2004; MONTEIRO-NETO V et al., 2020).

A escolha do SwissADME se fundamenta em sua ampla aceitação científica e na capacidade de integrar múltiplos parâmetros farmacocinéticos em uma única plataforma de análise. O software permite estimativas robustas de absorção, permeabilidade e propriedades físico-químicas, aspectos essenciais para prever o comportamento oral de compostos bioativos. Além disso, sua interface acessível e metodologia validada o tornam uma ferramenta confiável para estudos preliminares de prospecção de fármacos, contribuindo para análises eficientes e reprodutíveis no contexto acadêmico.

Mecanismos de absorção e interação com enzimas do citocromo P450:

Outras análises também foram realizadas com a plataforma Swiss ADME (http://www.swissadme.ch/), as quais incluíram: Absorção pelo trato gastrointestinal e pele, permeabilidade para a barreira hematoencefálica, interação com a glicoproteína P e com enzimas importantes do citocromo P450 (DAINA A et al., 2017).

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Evidências de atividades terapêuticas da curcumina

Há várias bibliografias que exploram as aplicações terapêuticas e medicinais da curcumina. Com o objetivo de salientar suas propriedades antioxidantes, um experimento com ratos portadores de Doença Renal Crônica (DRC) foi realizado. Nessa análise, as doses de curcumina administradas nos animais com DRC resultaram em diminuição dos metabólitos oxidativos, somados à redução na resistência vascular renal. Outrossim, apresentaram melhora na função renal e recuperação da hemodinâmica, comprovada pelo aumento do fluxo sanguíneo (SILVA EO, et al., 2022).

Meng ZW, et al. (2024) avaliaram a atividade terapêutica da cúrcuma longa em relação à doença Inflamatória intestinal que abrange a doença de Crohn e a Colite ulcerosa. Os resultados demonstraram que a curcumina pode mitigar a produção de citocinas pró-inflamatórias, tais como moléculas de adesão e o fator de necrose tumoral alfa (TNF-α) através de sua ação sobre fatores de transcrição e outras moléculas de sinalização. Ainda, o mesmo grupo de pesquisa publicou que o tratamento por via oral de camundongos com colite induzida é capaz de exercer efeitos protetores nesses animais, principalmente por causa de sua atividade anti-inflamatória e antioxidante (MENG ZW, et al., 2024).

A metanálise conduzida por Różański G, et al. (2023) demonstrou que a suplementação com curcumina, isoladamente ou associada a intervenções não farmacológicas como dieta e atividade física, promoveu reduções significativas nos níveis de alanina aminotransferase (ALT) e aspartato aminotransferase (AST), além de melhorias em parâmetros metabólicos como insulina de jejum, triglicerídeos, colesterol total e circunferência da cintura em pacientes com doença hepática gordurosa associada a distúrbios metabólicos (MAFLD). Esses achados reforçam a ação hepatoprotetora e reguladora da homeostase glicídica e lipídica da curcumina, sugerindo seu potencial como adjuvante no manejo dessa condição multifatorial.

De forma complementar, consolidando resultados de 25 metanálises, foram apontados os efeitos positivos da curcumina sobre diversos desfechos de saúde, incluindo melhora de perfis lipídicos, redução de marcadores inflamatórios e de estresse oxidativo, além de benefícios relacionados à função hepática e renal. Esses estudos também destacam impactos favoráveis em condições musculoesqueléticas, transtornos metabólicos e processos associados ao envelhecimento celular. Ademais, foi evidenciado que a curcumina exerce mecanismos semelhantes aos de agentes antidiabéticos, reduzindo a resistência à insulina, modulando vias metabólicas centrais e influenciando a composição da microbiota intestinal.

Essa multiplicidade de ações, conforme descrito por Xu Q, et al. (2025), amplia sua aplicabilidade terapêutica e reforça seu potencial como adjuvante em diferentes intervenções clínicas. Um outro estudo avaliou os efeitos terapêuticos da curcumina em ratos com doença cardiovascular induzida, com probabilidades de sofrerem um Acidente Vascular Cerebral (AVC). Os resultados mostraram que animais tratados apresentaram um perfil protegido contra a doença, evitando o óbito. Após análises, o efeito protetor observado foi atribuído a capacidade antioxidante da cúrcuma, especialmente através de sua ação na redução da produção de espécies reativas de oxigênio (ERO), os quais estão relacionados com a oxidação da lipoproteína de baixa densidade (LDL), formação de ateromas e aumento do risco cardiovascular (YANG C, et al., 2024).

Outros estudos também já associaram a curcumina como agente protetor em doenças cardiovasculares, destacando sua possível aplicação no tratamento da aterosclerose, uma vez que é capaz de reduzir os níveis séricos de colesterol total, triglicerídeos e lipoproteínas de baixa densidade (LDL-C), os quais estão diretamente ligados ao risco vascular, esses efeitos associados com as atividades anti-inflamatória e antioxidante demonstram esta droga como um novo potencial fármaco para o tratamento de doenças metabólicas, especialmente àquelas relacionadas com os níveis elevados de lipídios plasmáticos. Neste mesmo estudo, foi demonstrado que a curcumina também é capaz de reduzir quadros de esteatose hepática em camundongos (MENG ZW, et al., 2024).

Um ensaio clínico randomizado foi realizado envolvendo 5 tipos de artrite, dentre elas a osteoartrite. Os voluntários foram tratados por via oral com diferentes doses de curcumina, variando entre 120mg e 1.500mg por um período de 4 a 36 semanas. O tratamento foi capaz de reduzir o processo inflamatório e atenuar o gradiente de dor. Além disso, foram testadas também associações entre a curcumina e anti-inflamatórios não esteroides (AINEs), tendo como resultados a potencialização da analgesia e redução da rigidez articular (ZENG L, et al., 2022).

Além de todos os efeitos já aqui mencionados, Rutz J, et al. (2020) em seu estudo, descreveu o potencial da curcumina para o tratamento paliativo do câncer de bexiga. Esses dados foram obtidos de forma in vitro, através do cultivo de linhagens específicas de células. Os resultados mostraram que a curcumina é capaz de atuar nas células neoplásicas, reduzindo sua viabilidade. Além disso, em estudos in vivo, também foi capaz de contribuir na supressão de eventos metastáticos.

Esse efeito foi atribuído pela capacidade desta droga de modular a expressão da histona desacetilase, proteína necessária para o crescimento tumoral, uma vez que participa dos processos de replicação do DNA em células cancerígenas; portanto, neste estudo a curcumina foi capaz de atuar nos mecanismos de supressão da angiogênese, indução de apoptose e inibição da proliferação celular em células tumorais (RUTZ J, et al., 2020; KUNNUMAKKARA AB, et al., 2008).

Estudo da biodisponibilidade da administração por via oral da curcumina

De acordo com estudos prévios, uma molécula para ser bem absorvida por via oral e apresentar uma boa biodisponibilidade, tem que enquadrar-se pelo menos em três dos seguintes critérios: 1) Área de superfície polar total (ASPT) <140 A2; 2) Consenso de LogP ≤ 5; 3) Peso molecular <500 daltons; 4) Número de aceptores de ligações de hidrogênio ≤ 10; e 5) Número de doadores de ligações de hidrogênio ≤ 5 (LIPINSKI CA, 2004; MONTEIRO-NETO V, et al., 2020). O presente estudo demonstrou que a curcumina apresenta boa biodisponibilidade quando dada por via oral, uma vez que está dentro dos cinco parâmetros estabelecidos como valores de referência, como mostra a (**Tabela 1**).

Propriedades físico-químicas

Esse resultado pode ser atribuído, dentre outros fatores, a características físico-químicas da droga, tais como baixo peso molecular e lipossolubilidade. Portanto, uma das vias de administração para este potencial fármaco pode ser a enteral. Este resultado condiz com a literatura, uma vez que estudos já demonstram que a curcumina é bem absorvida pelo trato gastrointestinal, portanto pode ser utilizada para o tratamento sistêmico de doenças (ZENG L, et al., 2022; ALSULAIM AK, et al., 2023).

Tabela 1 - Biodisponibilidade oral da curcumina.

Parâmetro	Resultado
Fórmula	C21H20O6
Peso molecular	368,38 g/mol
Nº átomos pesados	27
Nº aro. átomos pesados	12
Fração Csp3	0,10
Nº ligações rotativas	7
Nº de aceptores de hidrogênio	6
Nº de doadores de hidrogênio	3
Refratividade Molar	103,70
ASPT	96,22 A2

Fonte: Santos SD, et al., 2026.

Mecanismos de absorção e interação com enzimas do citocromo P450

Após a primeira análise, outros testes foram performados através do uso do Swiss ADME, tais como absorção pelo trato gastrointestinal, permeabilidade a barreira hematoencefálica e pele, além da interação com enzimas hepáticas da família de heme-proteínas do citocromo P450.

Como descrito na **Tabela 2**, a molécula em questão apresenta alta absorção pelo trato gastrointestinal, no entanto, não atravessa a barreira hematoencefálica, nem é absorvida pela pele (log kp = -5,72 cm/s), corroborando com as análises prévias de biodisponibilidade.

Estudos anteriores já haviam publicado sobre a curcumina não atravessar a barreira hematoencefálica, tais como aqueles realizados por Barbara R, et al. (2017), no qual esta droga precisa ser integrada a nanopartículas para conseguir atingir o tecido nervoso.

O citocromo P450 é uma superfamília de enzimas principalmente hepáticas responsáveis pela metabolização de xenobióticos no organismo, dentre eles, a curcumina (CASTAÑO PR, et al., 2019).

Neste estudo foram avaliadas as interações com as seguintes enzimas desta classe: CYP1A2, CYP2C19, CYP2C9, CYP2D6 e CYP3A4, as quais são responsáveis pela metabolização da maioria dos fármacos utilizados para tratar doenças.

Os resultados demonstraram que a curcumina é capaz de ligar-se às enzimas CYP2C9 e CYP3A4, causando a inibição delas (**Tabela 2**), portanto, medicamentos e outras drogas metabolizadas por essas duas enzimas devem ser evitadas o uso concomitante, uma vez que o bloqueio dessas enzimas leva ao acúmulo de metabólitos tóxicos, o que pode gerar desequilíbrio em funções fisiológicas (ZHAO M, et al., 2021).

A inibição da atividade das enzimas CYP2C9 e CYP3A4 revela o risco real de interações medicamentosas quando combinada com fármacos metabolizados por essas isoenzimas. Isso pode provocar acúmulo de fármacos ativos ou metabólitos tóxicos e aumentar a probabilidade de efeitos adversos, sobretudo em terapias crônicas ou com fármacos de janela terapêutica reduzida.

Tais achados reforçam a necessidade de monitorização farmacológica rigorosa e avaliação clínica cuidadosa quando há uso concomitante de curcumina e outras drogas (CHEN X, et al., 2025).

Além disso, análises recentes têm reforçado que a modulação das isoenzimas do citocromo P450 pela curcumina pode apresentar efeitos mais amplos do que apenas a inibição direta observada para CYP2C9 e CYP3A4. De acordo com Chen Y, et al. (2025), compostos polifenólicos como a curcumina podem alterar não apenas a atividade catalítica, mas também a expressão gênica dessas isoenzimas, influenciando etapas de biotransformação hepática.

Essa regulação pode potencializar interações medicamentosas ao modificar a velocidade de depuração de fármacos essenciais, incluindo anticoagulantes, antiepilépticos e anti-hipertensivos. Assim, os achados reforçam que a presença da curcumina no organismo pode gerar variações significativas no metabolismo hepático, demandando maior cautela clínica e farmacoterapêutica, sobretudo em pacientes polimedicados.

Tabela 2 - Parâmetros farmacocinéticos da curcumina.

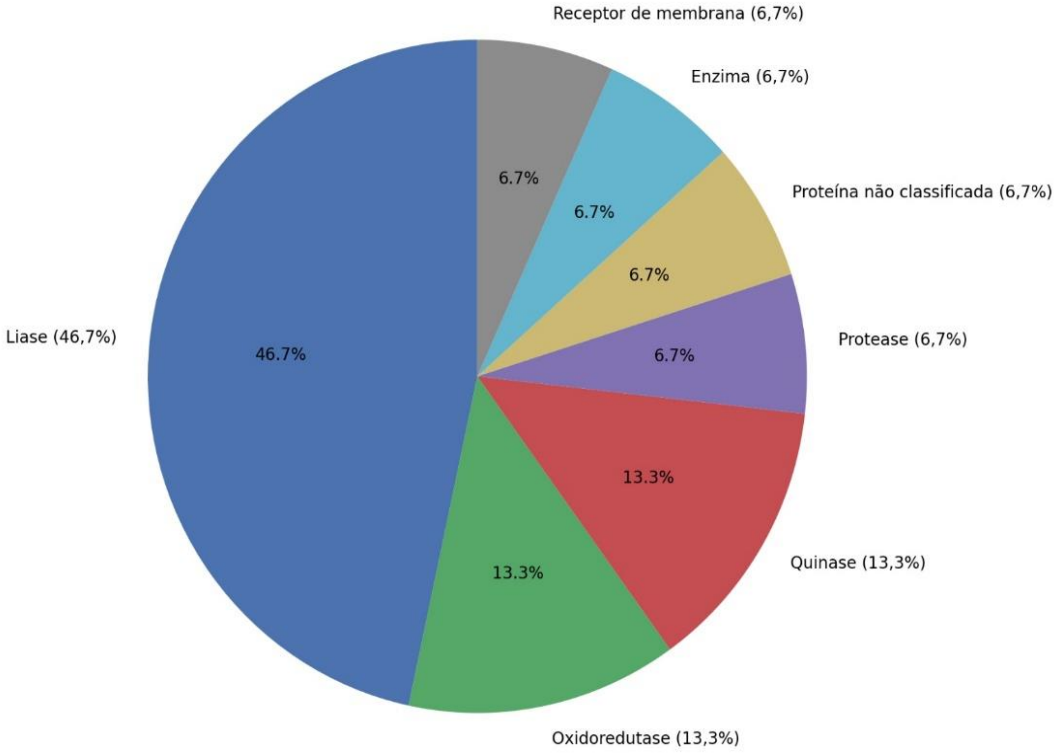
Parâmetro	Resultado
Absorção GI	Alta
BBB permeante	Não
Substrato P-gp	Não
Inibidor CYP1A2	Não
Inibidor CYP2C19	Não
Inibidor CYP2C9	Sim
Inibidor CYP2D6	Não
Inibidor CYP3A4	Sim
Log Kp (permeação da pele)	-5,72 cm/s

Fonte: Santos SD, et al., 2026.

Análise da farmacodinâmica da curcumina

Para análise da variedade de alvos biológicos possíveis de interação com a curcumina utilizou-se a plataforma Swiss Target Prediction. Da pesquisa realizada, encontrou-se 100 proteínas-alvos, destas, foram destacadas as 12 com maiores probabilidades de interação com a droga, as quais foram agrupadas em 7 categorias, sendo: 46,7% do tipo liase, 13,3% do tipo oxidoredutase, 13.3% do tipo quinase, 6,7% do tipo protease, 6.7% do tipo proteína não classificada, 6.7% do tipo enzima, e 6.7% do tipo receptor de membrana. Esses dados estão ilustrados no (**Gráfico 1**).

Gráfico 1 - Categoria das 12 principais proteínas – alvos para a curcumina em porcentagem.



Fonte: Santos SD, et al., 2026.

É importante ressaltar que essas moléculas estão amplamente distribuídas no organismo humano e exercem principalmente efeitos de regulação e sinalização celular, além de participarem do metabolismo de proteínas e efeitos pró e antioxidantes; a ligação com essas moléculas são sugeridas como mecanismos para os efeitos biológicos da curcumina. Dentro dessas classes, as 12 proteínas com maiores probabilidades de ligação com a droga estudada podem ser observadas na (**Tabela 3**).

Tabela 3 - Lista das proteínas com maiores probabilidades de apresentar sítios de ligação para a curcumina.

Alvo Biológico	Classe Biológica	Score (01-10)
Fator nuclear fator 2 relacionado ao eritróide 2	Proteína não classificada	10
Receptor do fator de crescimento epidérmico erbB1	Quinase	10
Anidrase carbônica II	Liase	10
Araquidonato 5-lipoxigenase	Oxidoredutase	10
Ciclo-oxigenase-1	Oxidoredutase	10
Anidrase carbônica VII	Liase	10
Proteína beta-amiloide A4	Receptor de membrana	10
Anidrase carbônica I	Liase	10
Araquidonato 15-lipoxigenase	Enzima	10
Anidrase carbônica VI	Liase	9
Metaloproteinase da matriz 9	Protease	9
Anidrase carbônica XII	Liase	9

Fonte: Santos SD, et al., 2026.

De acordo com Cui J, et al. (2025), a molécula não apenas demonstra alta afinidade por diversas proteínas, conforme apresentado na **Tabela 3**, mas também atua de modo funcional em vias inflamatórias bem estabelecidas, modulando a ativação de NF-κB (Fator Nuclear kappa B) e promovendo a translocação nuclear de Nrf2 (Fator Nuclear Relacionado ao Eritroide 2). Essa ativação leva à indução de genes antioxidantes, como HO-1 (Heme Oxigenase-1) e NQO-1 (NAD(P)H quinona oxidorredutase 1), reduzindo o estresse oxidativo e a produção de citocinas pró-inflamatórias, incluindo IL-6 (Interleucina-6) e TNF-α (Fator de Necrose Tumoral alfa).

Ademais, a interação da curcumina com alvos como ciclo-oxigenase e lipoxigenase, além de outras enzimas envolvidas na via do ácido araquidônico, sugere um efeito sinérgico capaz de potencializar sua ação anti-inflamatória e antioxidante. Tais mecanismos reforçam a relevância de seus alvos moleculares para sustentar os efeitos biológicos descritos em modelos experimentais e clínicos.

CONCLUSÃO

A curcumina é o principal princípio ativo da Cúrcuma, a qual já foi demonstrada pela literatura por apresentar diversos efeitos terapêuticos evidenciados através de testes in vitro, pré-clínicos e clínicos; dentre estes, pode-se destacar as atividades antioxidantes, anti-inflamatórias e antitumorais. No presente estudo os testes demonstraram que é bem absorvida pelo trato gastrointestinal, no entanto, não é capaz de atuar a nível cerebral nem penetrar pela pele. Ainda, atua como bloqueadora das enzimas CYP2C9 e CYP3A4, podendo causar o acúmulo de fármacos e outras drogas no corpo quando usada de forma concomitante com alguns medicamentos. As análises de alvos biológicos demonstraram que as biomoléculas com possíveis afinidades pela curcumina são bastante numerosas e variadas, o que é sugerido como uma possível explicação para seus efeitos terapêuticos. Sob a perspectiva clínica, esses achados reforçam a curcumina como um composto de interesse multifuncional, capaz de atuar em vias metabólicas, inflamatórias e oxidativas relevantes para doenças crônicas de alta prevalência, como distúrbios hepáticos, cardiovasculares e metabólicos. Assim, suas propriedades farmacológicas sugerem um papel promissor como adjuvante terapêutico, ampliando seu potencial de aplicação clínica. Com base nessas informações, a curcumina pode ser definida como uma molécula química importante no que diz respeito ao desenvolvimento de novos fármacos, no entanto, novas pesquisas com focos mais aplicados em modelos de doenças são necessárias para uma melhor consolidação do conhecimento deste composto.

REFERÊNCIAS

1. ALSULAIM AK, et al. Therapeutic potential of curcumin, a bioactive compound of turmeric, in prevention of streptozotocin-induced diabetes through the modulation of oxidative stress and inflammation. Molecules, 2023; 29(1): 128.

2. BARBARA R, et al. Novel curcumin loaded nanoparticles engineered for blood-brain barrier crossing and able to disrupt Abeta aggregates. International Journal of Pharmaceutics, 2017; 526(1-2): 413-424.
3. CASTAÑO PR, et al. Bioactivity of curcumin on the cytochrome P450 enzymes of the steroidogenic pathway. International Journal of Molecular Sciences, 2019; 20(18): 4606.
4. CASTILHOS PF, et al. Prevalência e fatores associados à utilização de plantas medicinais e fitoterapia no Brasil. Revista Fitos, 2023; 17(3): 400-410.
5. CHEN X, et al. Curcumin as a modulator of drug metabolism and gene expression: implications for drug–drug interactions. Frontiers in Pharmacology, 2025.
6. CHEN Y, et al. Curcumin as a modulator of drug metabolism and gene expression: Implications for pharmacogenomics. Biomedicine & Pharmacotherapy, 2025; 180: 116631.
7. CUI J, et al. Research progress on the mechanism of curcumin anti-oxidative stress based on signaling pathway. Frontiers in Pharmacology, 2025; 16: 1548073.
8. DAINA A, et al. SwissADME: a free web tool to evaluate pharmacokinetics, drug-likeness and medicinal chemistry friendliness of small molecules. Scientific Reports, 2017; 7(1): 1-13.
9. DAINA A, et al. SwissTargetPrediction: updated data and new features for efficient prediction of protein targets of small molecules. Nucleic Acids Research, 2019; 47(1): 357-364.
10. KUNNUMAKKARA AB, et al. Curcumin inhibits proliferation, invasion, angiogenesis and metastasis of different cancers through interaction with multiple cell signaling proteins. Cancer Letters, 2008; 269(2): 199-225.
11. LIPINSKI CA. Lead-and drug-like compounds: the rule-of-five revolution. Drug Discovery Today: Technologies, 2004; 1(4): 337-341.
12. MADDEN JC, et al. A review of in silico tools as alternatives to animal testing: principles, resources and applications. Alternatives to Laboratory Animals, 2020; 48(4): 146-172.
13. MENG ZW, et al. Use of curcumin and its nanopreparations in the treatment of inflammatory bowel disease. World Journal of Gastroenterology, 2024; 30(3): 280-282.
14. MONTEIRO NETO V, et al. Cuminaldehyde potentiates the antimicrobial actions of ciprofloxacin against Staphylococcus aureus and Escherichia coli. PLOS One, 2020; 15(5): 232987.
15. MORTON DB. A model framework for the estimation of animal 'suffering': its use in predicting and retrospectively assessing the impact of experiments on animals. Animals, 2023; 13(5): 800.
16. PANKNIN TM, et al. Curcumin supplementation and human disease: a scoping review of clinical trials. International Journal of Molecular Sciences, 2023; 24(5): 4476.
17. PRASAD S E AGGARWAL BB. Cúrcuma, a especiaria dourada: da medicina tradicional à medicina moderna. In: BENZIE IFF, WACHTEL-GALOR S, editores. Fitoterapia: aspectos biomoleculares e clínicos. Boca Raton: CRC Press/Taylor & Francis, 2011; 2: 13.
18. RÓŻAŃSKI G, et al. Meta-analysis of exploring the effect of curcumin supplementation with or without other advice on biochemical and anthropometric parameters in patients with metabolic-associated fatty liver disease. International Journal of Environmental Research and Public Health, 2023; 20: 4266.
19. RUTZ J, et al. Curcumin: a viable agent for better bladder cancer treatment. International Journal of Molecular Sciences, 2020; 21(11): 3761.
20. SILVA E de O., et al. Effect of curcumin on acute chronic kidney disease due to ischemia-reperfusion syndrome. Revista da Escola de Enfermagem da USP, 2022; 56: 20210440.
21. SILVESTRE F, et al. Pharmacokinetics of Curcumin Delivered by Nanoparticles and the Relationship with Antitumor Efficacy: A Systematic Review. Pharmaceuticals, 2023; 16(7): 943.
22. TRONCON LE. Novas drogas no tratamento da dispepsia funcional. Arq Gastroenterol, 2001; 38(3): 207-212.
23. XU Q, et al. Curcumin and multiple health outcomes: critical umbrella review of intervention meta-analyses. Frontiers in Pharmacology, 2025; 16: 1601204.
24. YANG C, et al. Review of the protective mechanism of curcumin on cardiovascular disease. Drug Design, Development and Therapy, 2024; 18: 165-192.
25. ZENG L, et al. Curcumin and Curcuma longa extract in the treatment of 10 types of autoimmune diseases: a systematic review and meta-analysis of 31 randomized controlled trials. Frontiers in Immunology, 2022; 13: 896476.
26. ZENG L, et al. Efficacy and safety of curcumin and Curcuma longa extract in the treatment of arthritis: a systematic review and meta-analysis of randomized controlled trials. Frontiers in Immunology, 2022; 13: 891822.
27. ZHAO M, et al. Cytochrome P450 enzymes and drug metabolism in humans. International Journal of Molecular Sciences, 2021; 22(23): 12808.