ISSN 2674-8584

Received: 10/01/2026 - **Accepted:** 28/01/2026
Vol: 01.03
DOI: 10.61164/b0rbfg33
Pages: 1-16

AVALIAÇÃO ANTIMICROBIANA *IN VITRO* E *IN SILICO* DO EXTRATO HIDROALCOÓLICO DE *LUFFA OPERCULATA* FRENTE A CEPAS DE *ESCHERICHIA COLI* E *STAPHYLOCOCCUS AUREUS* MULTIRRESISTENTES.

IN VITRO AND *IN SILICO* ANTIMICROBIAL EVALUATION OF THE HYDROALCOHOLIC EXTRACT OF *LUFFA OPERCULATA* AGAINST MULTIDRUG-RESISTANT STRAINS OF *ESCHERICHIA COLI* AND *STAPHYLOCOCCUS AUREUS*

Ana Emilly Lima da Costa
Farmácia, Centro Universitário Paraíso.
E-mail: anaemilly@aluno.unifapce.edu.br

Rafael Barbosa de Moura
Farmácia, Centro Universitário Paraíso.
E-mail: rafael.moura@fapce.edu.br

Catharina Cavalcanti Ribeiro de Sá
Farmácia, Centro Universitário Paraíso.
E-mail: catharina2004@aluno.unifapce.edu.br

Jeferson Lima Freitas
Farmácia, Centro Universitário Paraíso.
E-mail: oijeferson@aluno.unifapce.edu.br

Karollina Soares Loiola
Farmácia, Centro Universitário Paraíso.
E-mail: karollinaloiola@aluno.unifapce.edu.br

Maria Carla Chaves de Sousa
Farmácia, Centro Universitário Paraíso.
E-mail: mcarlachaves@aluno.unifapce.edu.br

Natalia de Brito Mota
Farmácia, Centro Universitário Paraíso.
E-mail: nataliamota@aluno.unifapce.edu.br

RESUMO

As plantas medicinais exibem ação farmacológica, mostrando efetividade frente a microrganismos patogênicos. A *Luffa operculata* é utilizada devido suas ações terapêuticas, apresentando propriedades anti-inflamatórias, antitumorais e antimicrobianas. Assim, a presente pesquisa busca investigar os possíveis efeitos antibacterianos do extrato hidroalcoólico de *Luffa operculata* frente a *Escherichia coli* 06 e *Staphylococcus aureus* ATCC 2600. Para isso, o extrato foi obtido em solução

ISSN 2674-8584

Received: 10/01/2026 - **Accepted:** 28/01/2026
Vol: 01.03
DOI: 10.61164/b0rbfg33
Pages: 1-16

hidroalcoólica, e a atividade antimicrobiana foi avaliada por meio de ensaios da determinação da concentração inibitória mínima. Além disso, realizou-se estudo *in silico* para avaliar a interação molecular da cucurbitacina B com a DNA girase B (6KZV) de *Escherichia coli* e com a Proteína 2a de Ligação à Penicilina (5M19) de *Staphylococcus aureus*, empregando técnicas de docking molecular. Os resultados demonstraram atividade antimicrobiana do extrato hidroalcoólico frente à *Staphylococcus aureus* com interações favoráveis observadas no estudo *in silico*, e não inibição do crescimento de *Escherichia coli*, o que se relaciona com o docking molecular, que identificou poucas interações entre a cucurbitacina B e a proteína bacteriana. Conclui-se que o extrato hidroalcoólico de *Luffa operculata* demonstrou atividade antimicrobiana frente a
Staphylococcus aureus ATCC 2600, mas não frente à *Escherichia coli* 06.

Palavras-Chave: *Luffa operculata*. Cucurbitacina B. Atividade antimicrobiana. *Escherichia coli*. *Staphylococcus aureus*.

ABSTRACT

Medicinal plants exhibit pharmacological action, demonstrating effectiveness against pathogenic microorganisms. *Luffa operculata* is used due to its therapeutic actions, presenting anti-inflammatory, antitumor, and antimicrobial properties. Thus, this research seeks to investigate the possible antibacterial effects of the hydroalcoholic extract of *Luffa operculata* against *Escherichia coli* 06 and *Staphylococcus aureus* ATCC 2600. For this purpose, the extract was obtained in hydroalcoholic solution, and the antimicrobial activity was evaluated through assays to determine the minimum inhibitory concentration. In addition, an *in silico* study was carried out to evaluate the molecular interaction of cucurbitacin B with DNA gyrase B (6KZV) of *Escherichia coli* and with PenicillinBinding Protein 2a (5M19) of *Staphylococcus aureus*, using molecular docking techniques. The results demonstrated antimicrobial activity of the hydroalcoholic extract against *Staphylococcus aureus*, with favorable interactions observed in the in silico study, and no inhibition of *Escherichia coli* growth. This is related to molecular docking, which identified few interactions between cucurbitacin B and the bacterial protein. It is concluded that the hydroalcoholic extract of *Luffa operculata* demonstrated antimicrobial activity against *Staphylococcus aureus* ATCC 2600, but not against *Escherichia coli* 06.

Key words: *Luffa operculata*. Cucurbitacin B. Antimicrobial activity. *Escherichia coli*. *Staphylococcus aureus*.

RSV
ISSN 2674-8584

Received: 10/01/2026 - **Accepted:** 28/01/2026
Vol: 01.03
DOI: 10.61164/b0rbfg33
Pages: 1-16

1. INTRODUÇÃO

As plantas medicinais vêm sendo utilizadas ao longo da história da humanidade para o tratamento de diversas enfermidades, especialmente por comunidades tradicionais, cujas práticas são baseadas na etnofarmacologia (BADIN; MANAÇAS; SOUZA, 2023). Diversos compostos bioativos presentes nesses vegetais apresentam propriedades terapêuticas promissoras, desde que utilizados de forma adequada, com reconhecimento botânico preciso, preparo correto e dosagem compatível com a segurança e a eficácia, conforme estabelecido por evidências científicas (PEDROSO; ANDRADE; PIRES, 2021).

A *Luffa operculata*, conhecida popularmente como “buchinha-do-norte”, é amplamente utilizada na medicina popular brasileira, notadamente como descongestionante nasal, emenagogo e purgativo, além de apresentar propriedades anti-inflamatórias, antitumorais e antimicrobianas (BADIN; MANAÇAS, 2022). Pertencente à família *Cucurbitaceae*, apresenta diversos fitoquímicos que são responsáveis por suas propriedades e contribuem para sua resposta fisiológica, como glicosídeos, saponinas, esteróis livres, compostos fenólicos, ácidos orgânicos e resinas, cujos constituintes isolados são elaterina A, cucurbitacinas B e D e isocucurbitacina B (HAFEEZ, 2024; HU/CCS, 2020).

Devido à variedade de compostos que produzem, as plantas terapêuticas exibem ação farmacológica, mostrando efetividade frente a microrganismos patogênicos, inclusive aqueles resistentes a antibióticos, podendo tanto inibir mecanismos de resistência quanto intensificar a ação dos antibióticos já disponíveis, configurando uma abordagem promissora no enfrentamento das infecções resistentes (MICKYMARAY, 2019).

O acesso a antibióticos eficazes prolonga a expectativa de vida, reduz incapacidades e diminui os custos com saúde; contudo, a resistência bacteriana representa um obstáculo para o alcance das metas relacionadas à sobrevivência e ao envelhecimento saudável, uma vez que aproximadamente 4,95 milhões de óbitos por infecções bacterianas estão associados a microrganismos resistentes, sendo cerca de 1,27 milhões atribuídos à resistência aos antibióticos atualmente disponíveis (OKEKE et al., 2024).

Especificamente, a *Luffa operculata* demostra eficácia do tratamento de rinossinusite bacteriana causada por *S. pyogenes* (SILVA et al., 2018). Seu extrato hidroalcoólico evidencia Concentração Inibitória Mínima (CIM) de 1.000 µg mL-1 para *E. coli*, 500 µg mL-1 para *S. aureus* e 2.000 µg mL-1 para *C. albicans* (BULKA et al., 2020). Também demostra atividade contra agentes causadores de infecções bacterianas das vias aéreas com atividade antibacteriana principalmente contra *S. pyogenes*, seguido por *S. pneumoniae* e *S. aureus* (SCALIA et al., 2014).

Entre os constituintes identificados na planta, observa-se uma ampla variedade de cucurbitacinas, destacando-se a prevalência de cucurbitacina B (CuB), que apresenta grupos funcionais oxigenados e regiosseletividade (LAMG et al., 2012). A cucurbitacina B é um derivado do hidreto de lanostano, estruturalmente modificado pela presença de substituintes de hidroxila, metila e oxo, além de possuir insaturações nas posições 5 e 23(NCBI, [s.d.]).

RSV
ISSN 2674-8584

Received: 10/01/2026 - **Accepted:** 28/01/2026
Vol: 01.03
DOI: 10.61164/b0rbfg33
Pages: 1-16

Estudos evidenciam que, quando associada a antibióticos, a CuB apresenta efeito sinérgico, capaz de intensificar de forma significativa a eficácia terapêutica frente a infecções causadas por *Staphylococcus aureus* (DAI et al., 2023). Essa substância está presente em elevadas concentrações em extratos obtidos a partir dos frutos da *Luffa operculata* (GALUCIO et al., 2021).

1.1 OBJETIVOS

Dessa forma, a presente pesquisa tem como objetivo investigar os possíveis efeitos antibacterianos do extrato hidroalcoólico de *Luffa operculata* frente a *Escherichia coli* com superexpressão de bomba de efluxo e *Staphylococcus aureus* resistente a meticilina (MRSA). Além disso, buscou avaliar por estudo *in silico*, a interação molecular da cucurbitacina B frente a DNA girase B de *E. coli* e Proteína 2a de Ligação à Penicilina de MRSA. Os resultados pretendem contribuir para o entendimento das ações antibacterianas da *Luffa operculata*, embasando discussões sobre sua prescrição.

2. REVISÃO DA LITERATURA

2.1 Plantas medicinais com ação antimicrobiana

As plantas contêm diversos compostos bioativos que apresentam benefícios medicinais e propriedades preventivas contra diferentes doenças, incluindo atividade antimicrobiana (KOWALSKI, 2020). Nesse contexto, investigações com extratos e compostos derivados de plantas sugerem que essa atividade é devida à ruptura e lise da parede celular, à estimulação da produção de espécies reativas de oxigênio, à inibição da formação de biofilme, à interferência na construção da parede celular, à inibição da replicação do DNA microbiano, à redução da síntese de energia e à neutralização das toxinas bacterianas (MICKYMARAY, 2019).

A atividade antimicrobiana de compostos ativos presentes em plantas como terpenos, flavonas, flavonóis e alguns alcaloides e fenilpropanoides, demonstram potencial promissor sendo dentre os mecanismos dessa atividade, o mais comum, a ruptura da membrana (ÁLVAREZ-MARTÍNEZ et al., 2021). De forma específica, a *Luffa operculata* demonstra eficácia no tratamento da rinossinusite bacteriana e inibição do crescimento de *S. pyogenes*, sendo uma das plantas medicinais mais utilizadas para o tratamento da rinossinusite (SILVA et al., 2018).

Além disso, plantas como *Punica granatum*, *Lavandula angustifolia*, *Echinacea purpurea* e *Bergenia crassifolia* apresentam efeito inibitório sobre diferentes microrganismos. Especificamente, *P. granatum* demonstra inibir *K. pneumoniae*, *L. monocytogenes*, *S. typhimurium*, *P. vulgaris*, *C. cyreosis* e *E. coli*; *L. angustifolia* atua contra *P. vulgaris, K. pneumoniae* e *S. typhimurium*; *E. purpurea* inibe *C. albicans*, *E. coli*, *P. vulgaris* e *K. pneumoniae*; e *B. crassifolia* atua contra *P. vulgaris*, *K. pneumoniae* e *S. typhimurium* (ZAZHARSKYI et al., 2019).

Os componentes derivados de plantas medicinais podem fornecer novas abordagens contra bactérias patogênicas, e com o número em expansão de patógenos resistentes a medicamentos, há uma necessidade crescente de

RSV
ISSN 2674-8584

Received: 10/01/2026 - **Accepted:** 28/01/2026
Vol: 01.03
DOI: 10.61164/b0rbfg33
Pages: 1-16

identificação e isolamento de novas moléculas bioativas de plantas por meio de procedimentos analíticos modernos e padronizados (VAOU et al., 2021).

2.2 Resistência bacteriana

A evolução da resistência aos antibióticos está em constante mudança e é imprevisível; contudo, análises experimentais, filogenéticas e ecogenéticas auxiliam na compreensão de sua dinâmica evolutiva e o planejamento de intervenções (BAQUERO et al., 2021). Nesse contexto, a resistência representa um desafio para sistemas de saúde, pois ameaça a capacidade de tratar infecções bacterianas de forma eficaz, sendo de grande importância a implementação de medidas de controle da resistência antimicrobiana (BELAY et al., 2024).

As bactérias desenvolvem constantemente mecanismos de resistência aos antibióticos, dentre os quais se destacam a mutação do alvo do medicamento, a secreção de hidrolases, a presença de bombas de efluxo, a produção de proteínas protetoras do alvo e alterações na morfologia celular, que são estratégias empregadas para superar o efeito inibitório dos fármacos, resultando no surgimento de bactérias multirresistentes, que representam uma ameaça à saúde humana. (Zhang; Cheng, 2022).

Staphylococcus aureus resistente à meticilina constitui uma das principais etiologias de infecções bacterianas, manifestando-se desde a colonização assintomática da mucosa nasal até infecções superficiais da pele e dos tecidos moles, além de quadros graves associados a altas taxas de mortalidade (LEE et al., 2018). Em geral, o fenótipo de resistência é resultante da aquisição de um gene exógeno responsável pela codificação de uma proteína ligadora de penicilina alternativa (PBP2a), que apresenta afinidade substancialmente reduzida por antibióticos β-lactâmicos, possibilitando a continuidade da biossíntese da parede celular mesmo na presença de concentrações normalmente inibitórias (PEACOCK; PATERSON, 2015).

Escherichia coli é um dos principais agentes etiológicos das infecções do trato urinário e, diante do aumento da resistência aos antibióticos que dificulta o tratamento dessas infecções, a superexpressão de sistemas de efluxo tem sido associada à resistência antimicrobiana, com destaque para os genes marA, yhiV e mdfA, os quais apresentam correlação com o aumento das concentrações inibitórias mínimas de diferentes antibióticos, sendo que fatores de risco como sexo, uso prévio de fluoroquinolonas e cateterização vesical também se associam à superexpressão desses genes, indicando que o aumento da expressão de bombas de efluxo contribui significativamente para a resistência às fluoroquinolonas em *E. coli* (YASUFUKU et al., 2011).

As infecções causadas por microrganismos multirresistentes (MDR) é preocupante pela dificuldade de acesso a tratamento, acarretando em internações mais prolongadas e aumento da morbidade e mortalidade dos pacientes, sendo que dados sugerem que 55% de *S. aureus* são MDR e que infecções causadas por bactérias como *Klebsiella pneumoniae* MDR e *Escherichia coli* MDR apresentam poucas opções terapêuticas para tratamento (KEBEDE; GADISA; TUFA, 2021).

3. METODOLOGIA

RSV
ISSN 2674-8584

Received: 10/01/2026 - **Accepted:** 28/01/2026
Vol: 01.03
DOI: 10.61164/b0rbfg33
Pages: 1-16

O presente estudo caracteriza-se como pesquisa exploratória. Utilizou-se o fruto (baga) de *Luffa operculata* (L.) Cogn. pertencente à família *Cucurbitaceae*; registrada no Herbário Virtual sob código NY01006657 (REFLORA, 1984). Foi adquirido em estabelecimento especializado em produtos naturais em Juazeiro do Norte - CE.

O preparo do extrato seguiu a metodologia adaptada de Sousa et al. (2018). As bagas foram descascadas e tiveram as sementes retiradas. Em seguida, 20 g de bagas foram adicionadas a 1400 mL de álcool etílico a 70%, permanecendo em contato com o solvente por duas semanas, com agitações periódicas para favorecer a extração dos compostos. Após esse período, o extrato foi filtrado e concentrado por rotaevaporação durante duas horas, obtendo o extrato purificado.

Foram realizados ensaios fitoquímicos visando à detecção de metabólitos secundários no extrato de *Luffa operculata*. Os testes basearam-se em reações colorimétricas específicas descritas na literatura, empregadas para a identificação de diferentes classes de compostos bioativos, conforme descrito a seguir.

1. Alcaloides – Determinados de acordo com a reação de Bouchardat.
2. Flavonoides – Determinados de acordo com a reação de Shinoda.
3. Antraquinonas – Determinados de acordo com a reação de Borntraeger.
4. Cumarinas – Determinados de acordo com a reação de Feigl.
5. Taninos e polifenóis – Determinados de acordo com o teste do cloreto férrico.

3.1 Concentração Inibitória Mínima

Os microrganismos empregados nos ensaios foram cedidos pelo Laboratório de Microbiologia e Biologia Molecular da Universidade Regional do Cariri (URCA). Foram utilizadas linhagens padrão de cepas resistentes de *Escherichia coli* 06 e *Staphylococcus aureus* ATCC 2600. O ensaio de Concentração Inibitória Mínima foi realizado pelo método de microdiluição em placa de 96 poços, conforme o Clinical & Laboratory Standards Institute. A solução-mãe do extrato hidroalcoólico de *Luffa operculata* foi preparada em concentração inicial de 1024 µg/mL, utilizando água destilada como diluente.

O meio de cultura utilizado foi o *Ágar Brain Heart Infusion* (BHI), preparado de acordo com as instruções do fabricante, esterilizado por autoclavagem e vertido em placas de Petri, solidificando-se em condições assépticas. O caldo BHI a 10% foi obtido com 100mL de água destilada em 10g do pó BHI, sendo levado a autoclave e reservado.

As culturas bacterianas foram preparadas a partir da semeadura das cepas em placas de Ágar BHI, incubadas durante 24 horas em estufa bacteriológica a 37°C. Os inóculos bacterianos foram preparados a partir de colônias da placa de Petri, suspensão destas em solução salina e homogeneização até alcançar turbidez com padrão McFarland 0.5.

Os testes de CIM foram realizados em triplicata, utilizando a mistura de BHI líquido e inóculo com a solução-mãe do extrato. O conteúdo foi homogeneizado por aspiração e dispensação repetida, sendo 100 µL transferidos sequencialmente para

RSV
ISSN 2674-8584

Received: 10/01/2026 - **Accepted:** 28/01/2026
Vol: 01.03
DOI: 10.61164/b0rbfg33
Pages: 1-16

os poços adjacentes até o penúltimo. O último poço correspondeu ao controle positivo, contendo apenas a mistura de bactéria e meio. As placas foram incubadas por 24 horas a 37 °C.

Após a incubação, 20 µL de solução de resazurina foram adicionados em cada poço, aguardando-se 1 hora para visualização da cor e interpretação dos resultados. Assim, os poços azuis indicaram supressão do crescimento bacteriano, enquanto poços rosas indicaram proliferação bacteriana. O poço controle obrigatoriamente apresentou coloração rosa, garantindo a validade do ensaio. A CIM foi determinada como a menor concentração da substância que permaneceu azul, indicando a capacidade do extrato de inibir a multiplicação bacteriana.

3.2 Docking molecular utilizando cucurbitacina B

A metodologia empregada foi adaptada de Moura (2025), com modificações para adequação ao protocolo experimental proposto. O *docking molecular* foi realizado na plataforma DockThor, desenvolvida pelo Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC). As estruturas dos ligantes, a análise e visualização dos compostos foram efetuadas no Discovery Visualizer Studio (Dassault Systèmes).

Foram utilizadas a estrutura cristalina da DNA girase B de *Escherichia coli* em complexo com um derivado de 2-oxo-1,2-di-hidroquinolina (PDB ID: 6KZV) e a estrutura cristalina da Proteína 2a de Ligação à Penicilina (PBP2a) de MRSA na presença do ligante oxacilina (PDB ID:5M19), ambas obtidas a partir no Protein Data Bank. O ligante cucurbitacina B foi obtido no PubChem (CID:5281316).

As estruturas proteicas foram preparadas por meio da remoção de moléculas de água e outros interferentes. Os sítios de ligação dos antibióticos de referência foram identificados para *E. Coli* e *S. aureus*, sendo respectivamente, -6,639429 17,040000 4,938678 (sítio 1) e -9,717710 -12,458770 56,751890 (sítio 4). Essas coordenadas foram utilizadas como centro da grade para o *docking molecular*, adotando-se um tamanho padrão de grade de X: 20; Y:20; Z:20.

Os resultados obtidos do *docking* incluíram as afinidades de ligação indicando energia dos complexos previstos. A visualização molecular foi realizada com foco nas conformações com menor energia de ligação entre ligante e proteína.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

O extrato hidroalcoólico puro de *Luffa operculata* foi obtido com rendimento de 80%. A prospecção fitoquímica demostrou presença/ausência dos metabólitos apresentados na Tabela 1.

Tabela 1 - Fitoquímicos presentes/ausentes no extrato

Fitoquímico	Resultado (+/-)	Análise
Antraquinonas	-	Amarelo claro
Cumarinas	-	Sem coloração
Alcaloides	+	Laranja avermelhado
Flavonoides	-	Branco
Taninos	-	Amarelo
Polifenóis	+	Amarelo

Fonte: elaborada pelos autores

RSV
ISSN 2674-8584

Received: 10/01/2026 - **Accepted:** 28/01/2026
Vol: 01.03
DOI: 10.61164/b0rbfg33
Pages: 1-16

Os metabólitos secundários foram identificados através de reações colorimétricas no extrato hidroalcoólico. Dessa forma, não houve a detecção de saponinas por teste de índice de espuma, pois o etanol em menor concentração aumenta a capacidade de formação de espuma, enquanto que em concentrações mais altas, essa formação é considerada desfavorável (LI et al., 2024).

Estes achados corroboram com dados previamente descritos que, por meio de reações colorimétricas, identificou a presença de alcaloides e fenóis, além de ausência de taninos e flavonoides no extrato da planta (ARROYO-SANDOVAL et al., 2022). De maneira semelhante, outros estudos relataram a presença de fenóis, bem como a ausência de taninos entre os metabólitos secundários (BADIN; MANAÇAS, 2022; SILVA et al., 2018). Complementando tais informações, a descrição fitoquímica em fonte institucional descreve que a composição da espécie inclui saponinas, fenóis e alcaloides (HU/CCS, 2020). Embora todos os estudos consultados tenham, além dos metabólitos citados, identificado saponinas na espécie, tal metabólito não foi detectado no presente estudo, possivelmente devido ao tipo de extrato empregado. Ainda assim, os dados disponíveis mantêm concordância com os resultados obtidos neste trabalho.

A menor concentração de um antibiótico capaz de impedir o crescimento de um microrganismo é definida como concentração inibitória mínima (CIM), que são testes que englobam diversas concentrações de antibióticos facilitando o tratamento antimicrobiano individualizado (IDELEVICH; BECKER, 2019). Essa técnica foi utilizada nesse estudo, para determinar a concentração necessária do um extrato capaz de impedir o crescimento das cepas resistentes selecionadas.

O extrato hidroalcoólico de *Luffa operculata* frente a *Escherichia coli* 06 demonstrou CIM igual ou superior a 1024 µg/mL. Entretanto, frente a *Staphylococcus aureus* ATCC 2600, foi observada CIM a partir de 512 µg/mL. Dessa forma, o extrato não demonstrou atividade frente à *E. coli* nas concentrações avaliadas, mas indicou atividade antimicrobiana contra *S. aureus* nos ensaios realizados.

Pode-se analisar uma maior sensibilidade de cepas de *S. aureus* ao extrato em comparação a cepas de *E. coli*. Em concordância com os resultados, estudo prévio empregando ensaios de concentração inibitória mínima por microdiluição para *S. aureus* ATCC 25923 e *E. coli* ATCC 25922, demonstrou que o extrato hidroalcoólico 65% apresentou CIM de 1.000 µg/mL para *E. coli* e 500 µg/mL para *S. aureus*. Esses valores se aproximam dos observados no presente estudo, tanto no quesito que envolve uma CIM menor para *S. aureus*, quanto com resultados que demonstram uma CIM maior que 512 µg/mL do extrato de *Luffa operculata* frente a cepas de *E. coli*. Ademais, os autores identificaram que os extratos etanólico e aquoso não alcançaram 100% de inibição das bactérias em concentrações inferiores a 2.000 µg/mL, embora tenham atingido pelo menos 50% de inibição (BULKA et al., 2020).

Além disso, em testes utilizando o método de macrodiluição em caldo, baseado na presença ou ausência de turbidez e na execução de semeadura para identificar crescimento bacteriano após exposição ao extrato alcoólico de *L. operculata* em diferentes concentrações, demonstrou-se que em concentrações de 0,2 e 0,3% com *S. aureus* ATCC-25923, *S. pneumoniae* ATCC-49619 e *S. pyogenes* ATCC-19615, o caldo bacteriano apresentou turbidez após 24 horas de incubação e

RSV
ISSN 2674-8584

Received: 10/01/2026 - **Accepted:** 28/01/2026
Vol: 01.03
DOI: 10.61164/b0rbfg33
Pages: 1-16

as semeaduras de 24 e 48 horas confirmaram presença de bactérias. Tubos contendo *L. operculata* a 0,4% e 0,5% com *S. aureus* apresentaram turbidez após 24 horas de incubação e as culturas de 24 e 48 horas confirmaram a presença da bactéria. Os tubos com o extrato a 1% e contendo *S. aureus* não apresentaram turbidez após um período de incubação de 24 horas, mas apresentaram crescimento após cultura de 24 e 48 horas. Por fim, o extrato de *Luffa operculata* a 2%, em caldo bacteriano com *S. aureus*, não apresentou turbidez após incubação de 24 horas e nenhum crescimento bacteriano em culturas de 24 e 48 horas (SCALIA et al., 2014). Esse comportamento reforça que diferentes concentrações de extratos semelhantes impactam diretamente o ponto em que a atividade antimicrobiana se manifesta, tal qual foi identificado no método descrito nessa pesquisa, a partir de diferentes respostas para as diferentes concentrações testadas.

Em estudo que investigou a atividade da *Luffa operculata* frente a *S. aureus*, *E. coli* e *Cândida albicans*, a partir da técnica de difusão em disco, placa de Petri e poços, foi observada uma hierarquia de eficácia entre os extratos testados, seguindo a seguinte ordem decrescente de atividade: extrato etanólico > extrato de acetato de etila > extrato de diclorometano > extrato de hexano (DELGADO-TIBURCIO et al., 2022).

Os dados anteriores demonstram atividade antimicrobiana positiva para a planta, apresentando variações na relação entre concentração e resposta. De forma consistente com esses achados, os resultados do atual estudo indicam que a atividade observada é concentração-dependente. Além disso, a variação nas metodologias empregadas pelos autores, assim como nos tipos de extratos e nas cepas utilizadas, pode explicar as divergências entre os valores de concentração necessários para a atividade antimicrobiana observada, indicando que embora os autores indiquem um potencial efeito antimicrobiano da planta, não é possível estabelecer uma comparação direta entre os estudos, devido particularidades metodológicas que influenciam nos resultados obtidos.

De modo complementar, a análise *in silico* contribui para fundamentar os resultados obtidos *in vitro*. Considerando que a *Luffa operculata* (L.) Cogn. apresenta uma ampla variedade de derivados de cucurbitacina, com predominância de cucurbitacina B (LANG et al., 2012), o *docking molecular* forneceu informações sobre as interações entre *S. aureus* e *E. coli* com a molécula de CuB.

Estudo anterior relata que a CuB apresenta propriedades biológicas, incluindo propriedades anticancerígenas, anti-inflamatória, antimicrobianas, antivirais, antienvelhecimento, antidiabéticas, anti-hipertróficas e antifibróticas (HASSAN et al., 2017).

De forma mais detalhada quanto à ação antimicrobiana do composto, em estudo que empregou o método de microdiluição em caldo utilizando placas de microtitulação de 96 poços, avaliaram o efeito antimicrobiano e o potencial sinérgico da cucurbitacina B em combinação com oxacilina (OX) e tetraciclina (TET), a partir da CIM, frente a *Staphylococcus aureus* (ATCC 29213) e *Staphylococcus aureus* resistente à meticilina (MRSA-ATCC 43300). Os autores demonstraram que a CuB apresentou atividade inibitória contra todas as cepas testadas, com CIM entre 0,2 e 0,44 µg/mL. Além disso, verificaram efeito sinérgico entre OX (0,14 µg/mL) e CuB (0,11 µg/mL), bem como entre TET (0,29µg/mL) e CuB (0,21 µg/mL), contra as cepas avaliadas (JAGESSAR; MOHAMED; GOMES, 2007).

RSV
ISSN 2674-8584

Received: 10/01/2026 - **Accepted:** 28/01/2026
Vol: 01.03
DOI: 10.61164/b0rbfg33
Pages: 1-16

A atividade inibitória observada contra MRSA pode ser explicada pela interação atrativa entre a CuB e a PBP2a, conforme demonstrado no *docking molecular* (Tabela 2). Já para a interação entre a CuB e DNA girase B de *E.coli*, as poses e ligações são descritas na Tabela 3.

Tabela 2 - Afinidade entre proteínas-ligantes com PBP2a

Modelo	Cálculo de afinidade
1	-7.412 kcal/mol
2	-7.266 kcal/mol
3	-6.904 kcal/mol
4	-6.579 kcal/mol
5	-6.573 kcal/mol
6	-5.285 kcal/mol

Fonte: elaborada pelos autores

Tabela 3 - Afinidade entre proteínas-ligantes com DNA girase B

Modelo	Cálculo de afinidade
1	-7.020 kcal/mol
2	-6.982 kcal/mol
3	-6.837 kcal/mol
4	-6.743 kcal/mol
5	-6.639 kcal/mol
6	-6.540 kcal/mol
7	-6.180 kcal/mol
8	-6.130 kcal/mol
9	-6.109 kcal/mol
10	-5.985 kcal/mol
11	-5.917 kcal/mol
12	-5.748 kcal/mol
13	-5.670 kcal/mol
14	-5.568 kcal/mol
15	-5.520 kcal/mol
16	-5.333 kcal/mol
17	-5.280 kcal/mol
18	-5.159 kcal/mol
19	-4.892 kcal/mol
20	-4.532 kcal/mol

Fonte: elaborada pelos autores

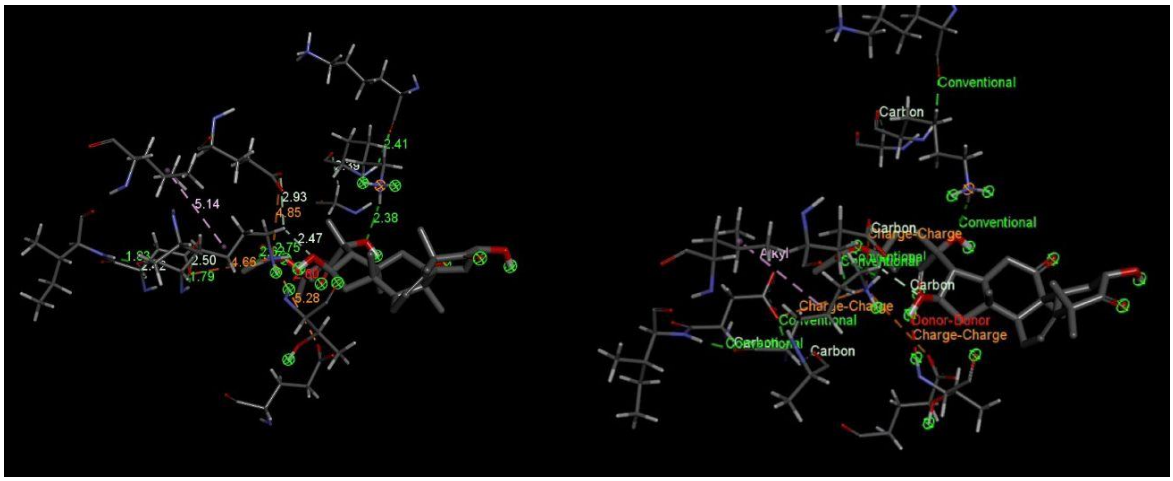
Estudos de *docking* indicam que, quanto mais negativa é a energia de ligação, mais estável e favorável tende a ser a interação entre o ligante e a proteína-alvo, sendo esse um parâmetro crítico nessas análises, pois expressa a força da interação entre as estruturas (KURMI; THAPA; KARATI, 2025). Ademais, o número de poses identificadas demonstra uma tendência de redução da melhoria à medida em que esse número aumenta (ATKOVSKA et al., 2014). Assim, infere-se que a interação entre CuB e PBP2a apresentou-se mais estável e favorável quando comparada à interação entre CuB e DNA girase B, o que está em concordância com os resultados de CIM, que demonstraram uma menor concentração do extrato de *Luffa operculata* necessária para inibir o crescimento bacteriano de MRSA e ausência de concentração identificável frente a *E. coli* 06, dentro das condições metodológicas estabelecidas.

Na proteína presente em MRSA, observou-se um número mais elevado de interações favoráveis, com diversas ligações registradas (Figura 3), enquanto na proteína de *E. coli* o padrão de interação foi consideravelmente menor (Figura 4).

ISSN 2674-8584

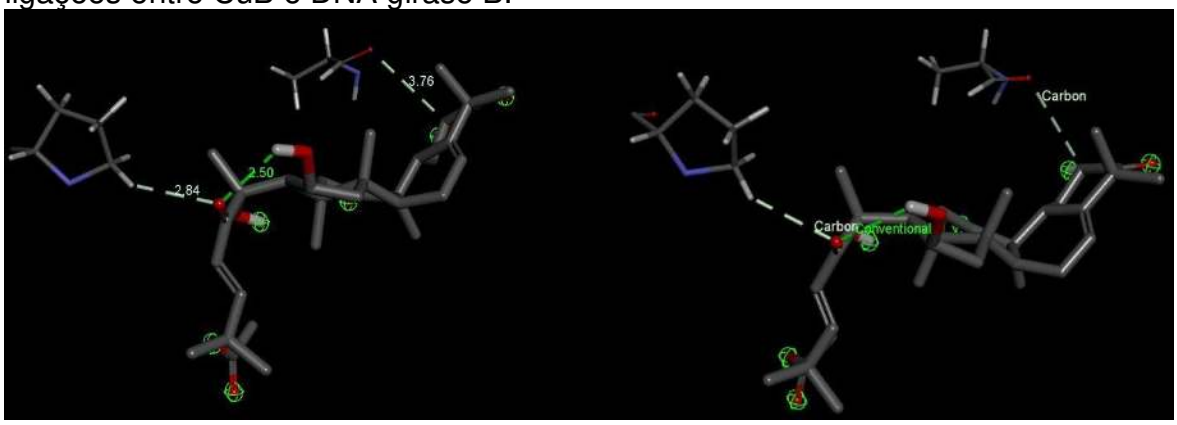
Received: 10/01/2026 - **Accepted:** 28/01/2026
Vol: 01.03
DOI: 10.61164/b0rbfg33
Pages: 1-16

Figura 1 - (a) Distâncias das ligações entre CuB e PBP2a (b) Tipos de ligações entre CuB e PBP2a.



Fonte: elaborada pelos autores no Discovery Studio Visualizer

Figura 2 - (a) Distâncias das ligações entre CuB e DNA girase B (b) Tipos de ligações entre CuB e DNA girase B.

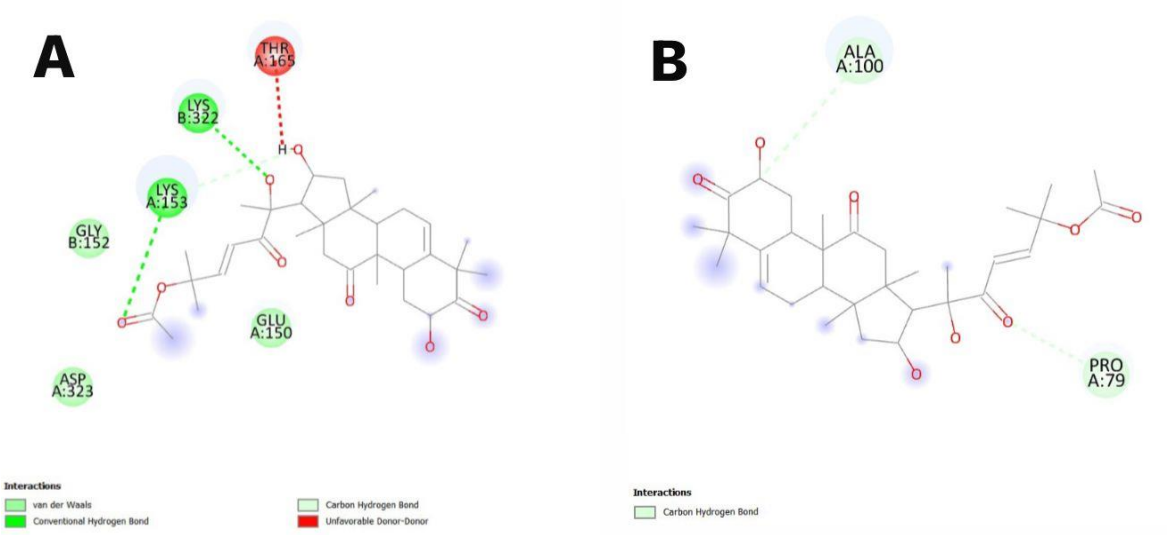


Fonte: elaborada pelos autores no Discovery Studio Visualizer

Figura 3 - (a) Diagrama em 2D das interações CuB-PBP2a (b) Diagrama em 2D das interações CuB-DNA girase B.

RSV
ISSN 2674-8584

Received: 10/01/2026 - **Accepted:** 28/01/2026
Vol: 01.03
DOI: 10.61164/b0rbfg33
Pages: 1-16



Fonte: elaborada pelos autores no Discovery Studio Visualizer

Existe um padrão de diferença entre as interações e resíduos presentes entre os complexos, destacando a presença de interações fortes em CuB-PBP2a. Essa interação, demonstra um número elevado de ligações favoráveis, incluindo ligações de hidrogênio convencionais, ligações carbono-hidrogênio e contatos eletrostáticos e hidrofóbicos, sugerindo que o ligante se acopla ao sitio ativo da proteína da MRSA. Os principais resíduos envolvidos foram Lisina (LysA:153 e LysB:322), além da participação de Ácido glutâmico (GluA:150), Glicina (GlyB:152) e Ácido aspártico (AspA:323) nas interações eletrostáticas e de proximidade. As distâncias apresentaram valores adequados, sendo 1.79 ångström a menor observada.

Em contraste, na análise do complexo CuB-DNA girase B, o ligante formou ligações mais fracas, como do tipo carbono-hidrogênio, envolvendo os resíduos Alanina (Ala100) e Prolina (Pro79). As distâncias de interação apresentaram 2.50 ångström como o menor valor.

A atividade antimicrobiana do extrato hidroalcoólico da *Luffa operculata* frente à MRSA foi evidenciada pelos ensaios de CIM, o que se alinha às interações favoráveis observadas no estudo *in silico*. Esses dados sugerem que compostos presentes no extrato possuem potencial para interferir em alvos moleculares relevantes dessa cepa.

Já para *E. coli*, não foi possível identificar uma CIM nas concentrações avaliadas, o que se relaciona com o *docking molecular*, que identificou poucas interações entre a CuB e a DNA girase B. Isso indica que, dentro das condições metodológicas aplicadas, não houve evidência de ação antimicrobiana significativa.

5. CONCLUSÃO

Com os resultados obtidos nesse estudo, concluiu-se que o extrato hidroalcoólico de *Luffa operculata* demonstrou atividade antimicrobiana frente a *S. aureus* ATCC 2600, mas não foi identificada frente a *E. coli* 06. Os resultados descritos sugerem a relação entre a cucurbitacina B e a PBP2a responsável pela atividade frente a MRSA. Diante disso, tornam-se necessários estudos futuros que

RSV
ISSN 2674-8584

Received: 10/01/2026 - **Accepted:** 28/01/2026
Vol: 01.03
DOI: 10.61164/b0rbfg33
Pages: 1-16

avaliem concentrações superiores do extrato frente a *E. coli* com mecanismos de resistência, além de investigações que empreguem métodos mais próximos de sistemas biológicos mais complexos para melhor compreensão da atividade antimicrobiana frente ao *S. aureus* resistente à meticilina.

REFERENCIAS

ÁLVAREZ-MARTÍNEZ, F. J. et al. Antibacterial plant compounds, extracts and essential oils: An updated review on their effects and putative mechanisms of action. **Phytomedicine**, v. 90, 153626, 2021. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.phymed.2021.153626.

ARROYO-SANDOVAL, Jorge Alejandro et al. Pharmacobotany, Phytochemical Analysis and Anti-inflammatory effect of the Ethanolic Extract of Luffa operculata. **Pharmacognosy Journal**, 14(3), p. 622-628, 2022. Disponível em: http://dx.doi.org/10.5530/pj.2022.14.80.

ATKOVSKA, Kalina, Samsonov et al. Multipose Binding in Molecular Docking. **International Journal of Molecular Sciences**, v. 15(2), p. 2622-2645, 2014. Disponível em: https://doi.org/10.3390/ijms15022622.

BADIN, Rebeka Caribé; MANAÇAS, Liliane Rosa Alves. Etnofarmacologia da Luffa operculata Cogn. In: Virgilio LR, organizador. **Ciências biológicas e suas múltiplas aplicabilidades**, Rio Branco: Stricto Sensu, p. 106-113, 2022. Disponível em: https://ninho.inca.gov.br/jspui/handle/123456789/15603.

BADIN, Rebeka Caribé; MANAÇAS, Liliane Rosa Alves; SOUZA Ivone Antônia. Avaliação toxicológica e determinação da dl 50 do extrato bruto de *Luffa operculata* Cogn. (*Cucurbitaceae*). **Arq. Ciênc. Saúde Unipar**, 27(7):3830-43, 2023. Disponível em: https://revistas.unipar.br/index.php/saude/article/view/9447.

BAQUERO, F. et al. Evolutionary Pathways and Trajectories in Antibiotic Resistance. **Clinical Microbiology Reviews**, v. 34, n. 4, e00050-19, 2021. Disponível em: https://doi.org/10.1128/CMR.00050-19.

BELAY, Wubetu Yihunie et al. Mechanism of antibacterial resistance, strategies and next-generation antimicrobials to contain antimicrobial resistance: a review. **Frontiers in Pharmacology**, v. 15, 2024. Disponível em: https://doi.org/10.3389/fphar.2024.1444781.

BULKA, Nathalia Rodrigues et al. Preliminary evaluation of antioxidant and antimicrobial activities of *Luffa Operculata* (L.) Cong. extracts. **Acta Scientiarum. Health Sciences**, v. 42, n. 1, p. e50847, 3 jul. 2020. Disponível em: https://periodicos.uem.br/ojs/index.php/ActaSciHealthSci/article/view/50847.

CLINICAL AND LABORATORY STANDARDS INSTITUTE (CLSI). Methods for dilution antimicrobial susceptibility tests for bacteria that grow aerobically. 12th ed.

RSV
ISSN 2674-8584

Received: 10/01/2026 - **Accepted:** 28/01/2026
Vol: 01.03
DOI: 10.61164/b0rbfg33
Pages: 1-16

CLSI standard M07. Wayne (PA): CLSI, 2024. Disponível em: https://clsi.org/shop/standards/m07/.

DAI, Shu et al. Cucurbitacin B: A review of its pharmacology, toxicity, and pharmacokinetics. **Pharmacological Research**, v. 187, 106587, 2023. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.phrs.2022.106587.

DELGADO-TIBURCIO, Eugenia Elisa et al. Pharmacokinetics and Biological Activity of Cucurbitacins. **Pharmaceuticals**, 15(11), 1325, 2022. Disponível em: https://doi.org/10.3390/ph15111325.

GALUCIO, Natasha Costa da Rocha, et al. Antiproliferative, genotoxic activities and quantification of extracts and cucurbitacin B obtained from *Luffa operculata* (L.) Cogn. **Arabian Journal of Chemistry**, 15(2):103589, 2021. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2021.103589.

HAFEEZ, Nabia. Phytochemical and Biological Studies of Cucurbitaceae: A MiniReview. **Phytopharmacology Research Journal**, [S. l.], v. 3, n. 1, p. 13–23, 2024. Disponível em: https://ojs.prjn.org/index.php/prjn/article/view/62.

HASSAN, Sherif T. et al. Cucurbitacin B interacts synergistically with antibiotics against *Staphylococcus aureus* clinical isolates and exhibits antiviral activity against HSV-1. **South African Journal of Botany**, v. 108, p. 90-94, 2017. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.sajb.2016.10.001.

HORTO DIDÁTICO DE PLANTAS MEDICINAIS DO HU/CCS. BUCHINHA-DO-NORTE. Florianópolis: Horto Didático de Plantas Medicinais do HU/CCS, 04 jan. 2020. Disponível em: https://hortodidatico.ufsc.br/buchinha-do-norte/.

IDELEVICH, Evgeny A.; BECKER, Karsten. How to accelerate antimicrobial susceptibility testing. **Clinical Microbiology and Infection**, 25(11):1347–1355, 2019. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.cmi.2019.04.025.

JAGESSAR, R. C.; MOHAMED, A.; GOMES, G. Antibacterial and antifungal activity of leaf extracts of *Luffa operculata* vs *Peltophorum pterocarpum* against *Candida albicans*, *Staphylococcus aureus* and *Escherichia coli*. **Nature and Science**, 5(4), 2007. Disponível em: https://www.sciencepub.net/nature/0504/12_0326_jagessar_ns0504.pdf.

KOWALSKI, Layza et al. Atividade Antimicrobiana de Flavonoides: uma Revisão de Literatura. **Revista Interdisciplinar em Ciências da Saúde e Biológicas**, v. 4, n. 1, 2020. Disponível em: https://doi.org/10.31512/ricsb.v4i1.119.

KURMI, Santosh Prasad Chaudhary; THAPA, Shankar; KARATI, Dipanjan. Molecular docking and pharmacokinetic evaluations of curcumin-based scaffolds as MDM2-p53 inhibitors. **Discover Chemistry**, v. 2, n. 53, 2025. Disponível em: https://doi.org/10.1007/s44371-025-00128-9.

RSV
ISSN 2674-8584

Received: 10/01/2026 - **Accepted:** 28/01/2026
Vol: 01.03
DOI: 10.61164/b0rbfg33
Pages: 1-16

LANG, Karen Luise et al. Synthesis and cytotoxic activity evaluation of dihydrocucurbitacin B and cucurbitacin B derivatives. **Bioorganic & Medicinal Chemistry**, v. 20(9), p. 3016-3030, 2012. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.bmc.2012.03.001.

LEE, Andie S. et al. Methicillin-resistant *Staphylococcus aureus*. **Nature Reviews Disease Primers**, v. 4, n. 18033, 2018. Disponível em: https://doi.org/10.1038/nrdp.2018.33.

LI, Weixin et al. Foam and fluid properties of purified saponins and non-purified water extracts from *Camellia oleifera* cake (byproduct). **Food Chem**, v. 440, 138313, 2024. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2023.138313.

MICKYMARAY, Suresh. Efficacy and mechanism of traditional medicinal plants and bioactive compounds against clinically important pathogens. **Antibiotics**, 8(4):257, 2019. Disponível em: https://doi.org/10.3390/antibiotics8040257.

MOURA, Rafael Barbosa. **Avaliação do docking molecular e da atividade antibacteriana modulatória das lectinas de *Canavalia ensiformis* (ConA) e *Canavalia brasiliensis* (ConBr) contra cepas bacterianas com bombas NorA e MepA**. Tese (Doutorado em Ciências Farmacêuticas) – Universidade Federal do Cariri, Barbalha, 95 f, 2025. (MOURA, 2025)

NATIONAL CENTER FOR BIOTECHNOLOGY INFORMATION. (+)-Cucurbitacin B. PubChem Compound. U.S. National Library of Medicine, [s.d.]. Disponível em: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Cucurbitacin-B.

OKEKE, Iruka N, et al. The scope of the antimicrobial resistance challenge. **Lancet**, 403(10442):2426-2438, 2024. Disponível em: https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/38797176/.

PEACOCK, Sharon J.; PATERSON, Gavin K. Mechanisms of Methicillin Resistance in *Staphylococcus aureus*. **Annual Review of Biochemistry**, v. 84, 577-601, 2015. Disponível em: https://doi.org/10.1146/annurev-biochem-060614-034516.

PEDROSO, Reginaldo dos Santos; ANDRADE, Géssica; PIRES, Regina Helena. Plantas medicinais: uma abordagem sobre o uso seguro e racional. **Physis**, 31(2), e. 310218, 2021. Disponível em: https://doi.org/10.1590/S0103-73312021310218.

RCSB PROTEIN DATA BANK. RCSB.org. Disponível em: https://www.rcsb.org/?ref=nav_home.

REFLORA – HERBÁRIO VIRTUAL. Registro NY01006657; determinador C. B. Heiser, 1984. Jardim Botânico do Rio de Janeiro. Disponível em: https://reflora.jbrj.gov.br/reflora/herbarioVirtual/ConsultaPublicoHVUC/ConsultaPublicoHVUC.do?idTestemunho=4729875.

RSV
ISSN 2674-8584

Received: 10/01/2026 - **Accepted:** 28/01/2026
Vol: 01.03
DOI: 10.61164/b0rbfg33
Pages: 1-16

SCALIA, Rodolfo Alexander et al. In vitro antimicrobial activity of *Luffa operculata*. **Brazilian Journal of Otorhinolaryngology**, v. 81(4), p. 422-430, 2014. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.bjorl.2014.07.015.

SILVA, Leonardo et al. Preclinical evaluation of *Luffa operculata* Cogn. and its main active principle in the treatment of bacterial rhinosinusitis. **Brazilian Journal of Otorhinolaryngology**, 84(1); p. 82-88, 2018. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.bjorl.2016.11.004.

SOUSA, Ian Jhemes Oliveira et al. Análise da toxicidade do extrato hidroalcoólico da poupa do fruto seco de *Luffa operculata* frente a náuplios de *Artemia salina* e meristemas de *Allium cepa*. **Revista Eletrônica de Farmácia**, 14(4), 2018. Disponível em: https://revistas.ufg.br/REF/article/download/45289/215901.

VAOU, Natalia et al. Towards Advances in Medicinal Plant Antimicrobial Activity: A Review Study on Challenges and Future Perspectives. **Microorganisms**, 9(10), 2041, 2021. Disponível em: https://doi.org/10.3390/microorganisms9102041.

YASUFUKU, Tomihiko et al. Correlation of Overexpression of Efflux Pump Genes with Antibiotic Resistance in Escherichia coli Strains Clinically Isolated from Urinary Tract Infection Patients. **Journal of Clinical Microbiology**, v. 49, n. 1, 2011. Disponível em: https://doi.org/10.1128/jcm.00827-10.

ZAZHARSKYI, V. V. et al. Antimicrobial activity of 50 plant extracts. **Biosystems Diversity**, v. 27(2), p. 163–169, 2019. Disponível em: https://doi.org/10.15421/011922.

ZHANG, Fusheng; CHENG, Wei. The Mechanism of Bacterial Resistance and Potential
Bacteriostatic Strategies. **Antibiotics**, 11, 1215, 2022. Disponível em: https://doi.org/10.3390/antibiotics11091215.