

ANÁLISE *IN SILICO* DO POTENCIAL ANTI-INFLAMATÓRIO E ANTIMICROBIANO DO A-BISABOLOL

Sarah Cristina de Souza, Elaine Roberta Leite de Souza, José Henrique de Araújo Cruz, Nílvia Maria Lima Gomes, Abrahão Alves de Oliveira Filho
sarahcrissouza@yahoo.com.br

Introdução: Desde o início da civilização humana, as plantas têm sido utilizadas com fins terapêuticos. Os óleos e extratos de plantas, assim como seus compostos terpênicos têm servido de base para diversas aplicações na medicina, indústria farmacêuticas, de alimentos e cosméticos, além de possuírem várias propriedades farmacológicas, como anti-inflamatória e antimicrobiana. O α -bisabolol é um álcool sesquiterpênico monocíclico amplamente utilizado em formulações cosméticas, o qual foi isolado inicialmente de flores da camomila (*Matricaria chamomilla*). **Objetivo:** analisar, *in silico*, o potencial antimicrobiano e anti-inflamatório do sesquiterpeno α -bisabolol. **Metodologia:** Para a realização dos estudos *in silico*, todas as informações químicas (estrutura química da molécula, massa molecular, polaridade, CAS-number) do terpeno utilizado (α -bisabolol) foram obtidas no site <http://www.chemspider.com/>. A Previsão do espectro de atividade para substâncias (PASS) online é um software gratuito projetado para avaliar o potencial biológico geral de uma molécula orgânica *in silico* sobre o organismo humano, onde fornece previsões simultâneas de muitos tipos de atividades biológicas com base na estrutura dos compostos orgânicos. **Resultados:** O estudo *in silico* demonstrou que o α -bisabolol tem um importante efeito antibacteriano ($P_a = 0,450$ e $P_i = 0,022$) e anti-inflamatório ($P_a = 0,748$ e $P_i = 0,027$) comprovado pela sua “Probabilidade de ser ativo” ser mais elevada que a “Probabilidade de ser inativo”, sendo tais resultados compatíveis com outros achados na literatura. **Conclusão:** Pode-se concluir que o α -bisabolol demonstra um bom potencial para as atividades anti-inflamatória e antimicrobiana tornando-se uma boa alternativa para utilização na Odontologia.