

ANALISE *IN SILICO* DO POTENCIAL ANTIVIRAL E ANTIFÚNGICO DO SESQUITERPENO A-BISABOLOL

Letícia Brasileiro Lopes, Elaine Roberta Leite de Souza, José Henrique de Araújo Cruz, Amanda Alves de Oliveira, Laryssa Tenório Diniz, Abrahão Alves de Oliveira Filho
leticiabrasileirolps@gmail.com

Introdução: 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 por possuírem diversas propriedades farmacológicas, dentre elas, o seu potencial como agente antifúngico e antiviral. O α -bisabolol é um álcool sesquiterpênico monocíclico amplamente utilizado em formulações cosméticas, sendo obtido principalmente através da destilação de flores da camomila (*Matricaria chamomilla*). **Objetivo:** analisar, *in silico*, o potencial antiviral e antifúngico 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 antiviral ($P_a = 0,664$ e $P_i = 0,004$) e antifúngico ($P_a = 0,520$ e $P_i = 0,010$) 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 antiviral e antifúngica tornando-se uma boa alternativa para utilização na Odontologia.