

## POTENCIAL ANTIULCEROGÊNICO E ANTIOXIDANTE DO SESQUITERPENO A-BISABOLOL: UM ESTUDO *IN SILICO*

Nathan Felipe de Brito Lima, Elaine Roberta Leite de Souza, José Henrique de Araújo Cruz, Abrahão Alves de Oliveira Filho

nathanodontologia@gmail.com

**Introdução:** Os terpenos denominados também diterpenóides ou isoprenóides formam uma grande e importante classe de substâncias derivadas de plantas, fungos e organismos marinhos, sendo conhecidos e utilizados pelas indústrias farmacêutica e cosmética por apresentarem diversas propriedades farmacológicas, dentre elas o seu potencial antioxidante e antiulcerogênico. Os sesquiterpenos são uma subclassificação desta classe, e dentre eles está o  $\alpha$ -bisabolol. **Objetivo:** analisar, *in silico*, o potencial antimicrobiano e anti-inflamatório do sesquiterpeno  $\alpha$ -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 ( $\alpha$ -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  $\alpha$ -bisabolol tem um importante efeito antioxidante ( $P_a = 0,310$  e  $P_i = 0,021$ ) e antiulcerogênico ( $P_a = 0,794$  e  $P_i = 0,004$ ) comprovado pela sua “Probabilidade de ser ativo” ser mais elevada que a “Probabilidade de ser inativo”, sendo esta atividade também demonstrada em outros trabalhos presentes na literatura. **Conclusão:** Pode-se concluir que o  $\alpha$ -bisabolol demonstra um bom potencial para as atividades antiulcerogênica e antioxidante tornando-se uma boa alternativa para prevenção e tratamento de diversas patologias.