

**POTENCIAL FARMACOLÓGICO E INSETICIDA DO ÓLEO ESSENCIAL DE *OCIMUM GRATISSIMUM*:
REVISÃO BIBLIOGRÁFICA E ABORDAGEM *IN SILICO***

Patrícia Santos (PG)^{1*}, Jaime Dias da Silva Filho (PG)¹, Antônio Jorge Fonseca Bento (IC)¹, Rosane Moura Aguiar (PQ)¹, Bruno Silva Andrade (PQ)¹

¹ Programa de Pós-Graduação em Química, Departamento de Química e Exatas, Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia, UESB. Jequié – BA, Brasil. 45205-490.

*e-mail: patty19saanthos@gmail.com

Ocimum gratissimum L. é uma planta aromática da família Lamiaceae, popularmente conhecida como alfavaca, alfavacão, manjerição-de-folha-larga. É nativa da África e do sudeste asiático, mas atualmente é cultivada em diversas regiões tropicais e subtropicais, incluindo o Brasil. Tradicionalmente, *Ocimum gratissimum* L. é utilizado na medicina popular no tratamento de infecções bacterianas e fúngicas, processos inflamatórios, distúrbios gastrointestinais, problemas respiratórios e dores de cabeça. Além do uso medicinal, também é empregado como condimento na culinária. O presente trabalho constitui-se de uma busca bibliográfica pelas substâncias descritas, como pertencentes ao óleo essencial de *Ocimum gratissimum* L. Além da realização de estudo do acoplamento dessas substâncias com receptores GABA A humano e o nAChR modelado do percevejo *Dichelops* spp. Para tanto, realizou-se um levantamento bibliográfico, na literatura, em artigos entre 2014 a 2024, nas bases de dados PubMed, Portal de Periódicos CAPES, Science Direct, SciELO e Google Acadêmico. As substâncias catalogadas da espécie foram submetidas a testes de acoplamento molecular contra o receptor GABA A humano (PDB: 6X3T), assim como contra o nAChR modelado do percevejo *Dichelops* spp. Com base na energia de ligação com o receptor GABA A, foram selecionados os cinco melhores complexos (Tabela 1): sabineno (-7,29 kcal/mol), α -terpineol (-7,27 kcal/mol), α -terpineno (-7,07 kcal/mol), timol (-7,04 kcal/mol) e canfeno (-6,99 kcal/mol). Também foram selecionados os cinco melhores ligantes contra o receptor nAChR: α -bergamoteno (-8,58 kcal/mol), α -cadinol (-8,55 kcal/mol), epi-cubebol (-8,35 kcal/mol), β -cariofileno (-8,28 kcal/mol) e *trans*-cariofileno (-8,27 kcal/mol). Apresentando-se como candidatas potenciais a inibidores do receptor GABA e do receptor nAChR, respectivamente. Abordagens complementares, como simulações de dinâmica molecular e experimentos biológicos, serão necessárias para validar estas previsões computacionais.

Tabela 1. Avaliação dos compostos do óleo essencial de *Ocimum gratissimum* L. contra o GABA.

Compostos	Posição	E.L. (Kcal.mol ⁻¹)	Ki (μ M)
Sabineno	4	-7,29	4,57
α -Terpineol	2	-7,27	4,7
α -Terpineno	7	-7,07	6,57
Timol	10	-7,04	6,88
Canfeno	3	-6,99	7,51

Tabela 2. Avaliação dos compostos do óleo essencial de *Ocimum gratissimum* L. contra o nAChR.

Compostos	Posição	E.L. (Kcal mol ⁻¹)	Ki (μ M)
α -Bergamoteno	2	-8.58	517,02
α -Cadinol	4	-8.55	537,01
epi-Cubebol	5	-8.35	759,75
β -Cariofileno	6	-8.28	859,47
<i>trans</i> -cariofileno	8	-8.27	859,99

Agradecimentos. CAPES.FAPESB UESB. PGQUIM. Laboratório de Óleos Essenciais, Laboratório de Bioinformática e Química Computacional.

[1] KIM, J.J., GHARPURE, A., TENG, J. et al. Shared structural mechanisms of general anaesthetics and benzodiazepines. *Nature* 585, 303–308 (2020). DOI: 10.1038/s41586-020-2654-5.[2] SILVA FILHO, J. D. Estudo de inibidores do receptor nicotínico de acetilcolina (nAChR) de percevejos *Diceraeus* spp., utilizando compostos químicos identificados em óleos essenciais de plantas do semiárido brasileiro. 2025. 127 f. Dissertação de Mestrado (Mestrado em Química) – Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia, Jequié, 2025.[3] MORALES-PEREZ CL, NOVELLO CM, HIBBS RE. X-ray structure of the human $\alpha 4 \beta 2$ nicotinic receptor. *Nature*. 2016 Oct 20;538(7625):411-415. DOI: 10.1038/nature19785. Epub 2016 Oct 3. PMID: 27698419; PMCID: PMC5161573