

ANÁLISE FARMACOLÓGICA *IN SILICO*: POTENCIAL INIBITÓRIO FRENTE A ENZIMA ACETILCOLINESTERASE DOS CONSTITUINTES QUÍMICOS DO ÓLEO ESSENCIAL DE *Citrus sinensis* (L).

Rafaela Rolim da Silva¹; Antônia Tavares Barbosa², Josiele Viana Gomes³, Geovania Santos de Souza⁴, Bruna Ribeiro de Lima⁵, Gustavo Frigi Perotti⁶, Dominique Fernandes de Moura do Carmo⁷.

1 – Autor principal, pós-graduação, Instituto de Ciências Exatas e Tecnologia - ICET-UFAM, Itacoatiara, AM, rafaelasillva097@gmail.

2– coautor, graduação, Instituto de Ciências Exatas e Tecnologia – ICET-UFAM, Itacoatiara, AM, antoniatavares92@hotmail.com.

3- coautor, pós-graduação, Instituto de Ciências Exatas e Tecnologia - ICET-UFAM, Itacoatiara, AM, josy.has.josiele@gmail.com.

4- coautor, graduação, Instituto de Ciências Exatas e Tecnologia – ICET-UFAM, Itacoatiara, AM, geovania076@gmail.com.

5- coautor, pós-doutorado, Departamento de Bioprocessos e Biotecnologia Faculdade de Ciências Agrônomicas, UNESP/Campus de Botucatu, Botucatu, SP, bruna.r.lima@unesp.br.

6-coautor, docente, Instituto de Ciências Exatas e Tecnologia – ICET-UFAM, Itacoatiara, AM, gustavoperotti@ufam.edu.br

7- coautor, docente, Instituto de Ciências Exatas e Tecnologia – ICET-UFAM, Itacoatiara, AM, dominiquefmc@ufam.edu.br.

A doença de Alzheimer (DA) é a principal causa de demência entre os idosos e estudos têm demonstrado que cerca de 10% da população com idade acima de 65 anos é atingida por esta enfermidade. Os inibidores da atividade da enzima acetilcolinesterase (AChE) promovem um aumento na concentração e duração da ação da acetilcolina sináptica, minimizando as perturbações na função cognitiva. Portanto, a busca por AChE de origem natural representa uma fonte alternativa para o tratamento da doença de Alzheimer. Diante deste contexto, o objetivo deste trabalho foi realizar ensaios *in silico* através de simulações de *docking* molecular pelos programas AutoDock para avaliar o potencial inibitório dos constituintes majoritários do óleo essencial das cascas de *Citrus sinensis* (L) frente à enzima acetilcolinesterase (AChE). O óleo essencial (OE) foi extraído por meio de hidrodestilação em aparelho clewenger durante 3 horas e analisado por cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massa (CG-EM) e os constituintes majoritários foram avaliados pelo método *in silico* utilizando o software AutoDock Vina 1.1.2. No cromatograma do OE foram identificados 33 constituintes da classe dos monoterpenos e sesquiterpenos. Os compostos majoritários identificados foram os monoterpenos de hidrogênio: β -citroneleno (7,33%), β -Pineno (9,63%); os monoterpenos oxigenados: 3-carene-2-santalenone (8,43%), eugenol (4,24%), limoneno-10-ol (8,26%); os sesquiterpenos de hidrogênio: α -humuleno (10,52%), α -neo-clovene (4,83%) e β -acoradieno (12,47%). Na avaliação *in silico* foi possível observar a inibição da enzima acetilcolinesterase pelos constituintes β -citroneleno, limoneno, β -acoradieno e α -humuleno e os valores de energia de ligação variaram entre -6,2 a -9,6 kcal/mol, valores próximos ao inibidor galantamina (energia de ligação do *redocking* = -9,8 kcal/mol, RMSD 0,3678 Å). Através dos resultados obtidos concluiu-se que outros estudos devem ser realizados para corroborar com este trabalho, portanto, a realização de ensaios *in vitro* e *in vivo* se fazem necessário para comprovar o potencial do OE das cascas de *Citrus sinensis* (L) frente à enzima acetilcolinesterase (AChE).

Palavras-chave: Alzheimer; acetilcolina; óleo essencial; inibição.