

CARACTERIZAÇÃO *IN SILICO* DO FENCHOL COMO POTENCIAL AGENTE ANSIOLÍTICO

Maria Clara Tomé Macedo (mmariaclara0612@gmail.com)

Thais Gomes Albuquerque (thais.albuquerque2312@gmail.com)

Bianca Nara Sousa de Vasconcelos Pereira (biancaapereira14@gmail.com)

Beatriz Ferreira Gomes Frota (beatrizferreiragomesfrota@gmail.com)

Maria Eduarda Ribeiro de Brito (dudaribeiro20112002@gmail.com)

Nelson Viana Feitosa Pinto (nelsonbiomed09@gmail.com)

Marcus Vinicius Oliveira Barros de Alencar (marcus.alencar@uninta.edu.br)

Introdução – A ansiedade é um transtorno mental multifatorial que envolve alterações nos sistemas GABAérgico, dopaminérgico, serotoninérgico e no eixo hipotálamo-hipófise-adrenal (HPA), resultando em desequilíbrio emocional e fisiológico. Apesar dos avanços no tratamento, a maioria dos fármacos ansiolíticos convencionais possuem eficácia limitada e efeitos adversos significativos. Nesse cenário, a prospecção *in silico* de bioativos com atividade dirigida a alvos moleculares relacionados à ansiedade representa uma estratégia terapêutica relevante para o avanço da neuropsicofarmacologia e a busca por ansiolíticos de melhor perfil farmacológico. **Objetivo** - Avaliar por meio de abordagens computacionais a toxicidade do Fenchol e sua atividade em vias-chave do transtorno de ansiedade. **Métodos** - Trata-se de um estudo experimental, com abordagem *in silico*, de caráter qualitativo. A análise da toxicidade e perfil farmacocinético do Fenchol foram conduzidas pelas plataformas ProTox (versão 3.0) e SwissADME. As plataformas PASS Online e SwissTarget Prediction, por sua vez, foram utilizadas para predição de atividades e alvos biológicos potenciais em distúrbios de ansiedade, delineando o perfil farmacológico do composto e inferindo seus possíveis mecanismos de ação. **Resultados** - O Fenchol (C₁₀H₁₈O), monoterpene encontrado em óleos essenciais de espécies como *Ocimum basilicum* (manjeriço) e *Foeniculum vulgare* (erva-doce), apresentou propriedades físico-químicas favoráveis, com peso molecular de 154,25 g/mol e LogP 2,50, o que favorece a absorção oral e a permeação na barreira hematoencefálica, além de não inibir as principais enzimas do citocromo P450. As predições no SwissTarget Prediction indicaram afinidade por receptores GABA- α e GABA- β , dopaminérgico D2,

androgênico (AR), estrogênicos (ER α e ER β) e glicocorticoide (NR3C1), relacionados à modulação emocional e ao eixo HPA. Além disso, aponta-se possível modulação de anidrases carbônicas (CA1, CA2, CA4), enzimas envolvidas na regulação do equilíbrio ácido-base neuronal e na sinalização GABAérgica, cujo bloqueio pode aumentar a atividade inibitória do GABA, promovendo efeitos ansiolíticos. Por fim, o PASS Online indicou uma probabilidade de atividade de 0,681 para potencial do composto em tratamentos fóbicos e 0,833 para inibidor de JAK2, via crítica de resposta ao estresse e indução da neuroinflamação, reforçando seu potencial modulador em vias relacionadas à ansiedade. **Conclusões** - Os achados *in silico* apontam que o Fenchol apresenta potencial efeito contra a ansiedade, atuando sobre diferentes vias neurais e hormonais. Além disso, o perfil farmacocinético e de segurança observado sustenta a viabilidade do composto como candidato promissor para investigação experimental. Assim, este estudo preliminar fornece base teórica para o delineamento de futuras etapas *in vitro* e *in vivo*, direcionando a validação de sua eficácia biológica.

Palavras-chave: Saúde mental, Bioprospeção, Produtos naturais, Bioinformática.