

## BERGAMOTENO: INTEGRAÇÃO *IN SILICO* PARA APLICAÇÕES NEUROBIOTECNOLÓGICAS

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

Beatriz Ferreira Gomes Frota (beatrizferreiragomesfrota@gmail.com)

Afonso Martins Estevam (afonsomartinsestevam00@gmail.com)

Maria Clara Tomé Macedo (mmariaclara0612@gmail.com)

Antônia Silmara Nascimento Linhares (silmaranascimento1515@gmail.com)

Nelson Viana Feitosa Pinto (nelsonbiomed09@gmail.com)

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

**Introdução** - Os Transtornos do Pânico (TP) e Obsessivo-Compulsivo (TOC) representam condições psiquiátricas debilitantes e com resposta limitada às terapias farmacológicas atuais. Nesse cenário, compostos naturais como o bergamoteno, presente em óleos essenciais cítricos, surgem como possíveis moduladores de vias neuroquímicas. As abordagens *in silico* permitem prever interações moleculares e genéticas, facilitando a descoberta de novos candidatos neuromoduladores. **Objetivo** – Mapear por meio de abordagem computacional, os possíveis alvos proteicos e genes relacionados à atividade do bergamoteno no TP e TOC. **Metodologia** – Conduziu-se uma análise *in silico* baseada em predição de alvos e associação gene-doença. A estrutura 3D do bergamoteno foi obtida no banco de dados PubChem (CID: 8757) e submetida ao servidor TargetNet para predição de proteínas-alvo humanas. Os alvos com maior probabilidade de interação tiveram sua identidade e função confirmadas na base de dados UniProt. Paralelamente, realizou-se um levantamento de genes associados ao TOC na plataforma DisGeNET, selecionando-se aqueles com os maiores escores de associação gene-doença. Por fim, foi analisada a sobreposição e a convergência funcional entre os alvos preditos para o bergamoteno e os genes relacionados às patologias. **Resultados** – No TargetNet, destacaram-se como principais proteínas o receptor muscarínico de acetilcolina M4 (CHRM4) e o receptor adrenérgico alfa-2C (ADRA2C), ambos com probabilidade de interação = 1,0. Essas proteínas estão envolvidas na modulação colinérgica, adrenérgica

e dopaminérgica, fundamentais para o controle do medo, da ansiedade e de comportamentos compulsivos. O BLAST confirmou 100% de identidade dessas proteínas com sequências humanas. No DisGeNET, foram identificados, para TP, os genes CCKBR (0,85) e HTR1A (0,80); e para TOC, os genes SLC6A4 (1,0) e BDNF (1,0). A convergência entre esses genes e as proteínas preditas indica que o bergamoteno pode atuar em vias serotoninérgicas, colinérgicas e adrenérgicas relacionadas aos transtornos estudados. **Conclusão** – Os resultados sugerem que o bergamoteno apresenta potencial neuromodulador, por meio de possível interação com os receptores CHRM4 e ADRA2C, em consonância com genes críticos dessas condições. No entanto, estudos futuros são necessários para avaliar o bergamoteno como candidato promissor na neurobiotecnologia de transtornos ansiosos.

Palavras-chave: Ontologia gênica, sesquiterpeno, bioinformática, transtornos ansiosos.

Agradecimentos: Centro Universitário Inta – UNINTA, bolsa de pesquisa.