

RESUMO SIMPLES - CEXA - CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA

**EXPLORANDO A EFICÁCIA DOS ÓLEOS ESSENCIAIS COMO
INSETICIDAS: INTEGRAÇÃO DE DOCKING MOLECULAR E TESTES IN
VIVO**

Jaime Dias Da Silva Filho (jaimesdias@gmail.com)

Maria Paula Pereira Sousa (paulapereirasousa2901@gmail.com)

Erenilson Dos Santos Moreira (erenilson059@gmail.com)

Júlia Ellen Barboza Aguiar (uesbcertificados13@gmail.com)

Mario Rodrigues Oliveira (mariorodriguesolivei@gmail.com)

Luis Felipe Santana Aguiar (Luisfelipe.aguiar1314@gmail.com)

Os óleos essenciais, extraídos de plantas, estão despertando interesse como alternativas aos inseticidas convencionais devido às suas propriedades naturais e menor impacto ambiental. Neste estudo, investigaremos a atividade inseticida de compostos de óleos essenciais contra percevejos *Dichelops* spp., pragas da cultura do trigo e milho. A abordagem integrada de teste in silico através de docking molecular e testes in vivo será empregada para avaliar a eficácia desses compostos. O docking molecular já está sendo processado e em análise para prever a interação desses compostos com o receptor nicotínico de

acetilcolina (nACh), essencial para a transmissão de impulsos nervosos em insetos. A simulação computacional permitirá a identificação de moléculas candidatas com forte afinidade e interações estáveis com o receptor, sugerindo seu potencial como inseticidas. Como a pesquisa ainda está em andamento, em seguida, os compostos selecionados serão submetidos a testes in vivo para avaliar sua toxicidade e eficácia. Os bioensaios demonstrarão a atividade dos compostos de óleos essenciais, que poderão ou não causar mortalidade nos insetos-alvo. Em caso, positivo, confirmando sua atividade inseticida. Espera-se que os resultados obtidos forneçam insights sobre a eficácia dos óleos essenciais como inseticidas, bem como sua viabilidade como alternativa sustentável. A identificação de moléculas candidatas com atividade inseticida e a validação por meio de testes in vivo contribuirão para o desenvolvimento de estratégias inovadoras e ecologicamente corretas no controle de pragas agrícolas. A integração de técnicas computacionais avançadas, como o docking molecular, com experimentos práticos em testes in vivo proporcionará uma abordagem abrangente e eficaz para o desenvolvimento de inseticidas naturais contra estes insetos. Essa estratégia inovadora não apenas identificará potenciais agentes de controle destas pragas, mas também contribuirá para a sustentabilidade ambiental e a preservação da biodiversidade. De forma que, a combinação de óleos essenciais, docking molecular, testes in vivo e nACh representará uma abordagem promissora para a descoberta e desenvolvimento de novos inseticidas eficazes e ecologicamente éticos. Essa pesquisa destacará a importância da investigação interdisciplinar na busca por soluções sustentáveis para o controle destas pragas agrícolas.

Palavras-chave: óleos essenciais; inseticidas; docking molecular; nACh; testes in vivo.