

## VII SBOE - Simpósio Brasileiro de Óleos Essenciais

Ciência, Tecnologia e Inovação na Amazônia

15 a 18 de outubro de 2013

UFOPA - Universidade Federal do Oeste do Pará - Santarém - Pará

ISBN - 978-85-66836-05-9

### ATIVIDADE ANTIFÚNGICA E DOCAGEM MOLECULAR DO TIMOL PRINCIPAL COMPONENTE DO ÓLEO ESSENCIAL DE *Lippia organoides* SOBRE O CAUSADOR DA FUSARIOSE EM PIMENTA-DO-REINO

Shirley M. da Luz<sup>1</sup>, Erisléia N. Meireles<sup>1</sup>, Soelange B. Nascimento<sup>2</sup>, Cláudio N. Alves<sup>2</sup>,  
Joyce Kelly do R. da Silva<sup>1</sup>, Alessandra R. Ramos<sup>3</sup>, José Guilherme Maia<sup>2</sup>.

<sup>1</sup>Programa de Pós-Graduação em Biotecnologia, UFPA, 66075-900, Belém - Pará - Brasil.

<sup>2</sup>Programa de Pós-Graduação em Química, UFPA, 66075-900, Belém - Pará - Brasil.

<sup>3</sup>Faculdade de Ciências Exatas e Naturais, UFPA, 68501-970, Marabá - Pará - Brasil.

Palavras-chave: *Fusarium solani* f. sp. *piperis*; timol; docagem molecular;  $\beta$ -glicosidase.

**Introdução.** No Brasil, a pimenta do reino (*Piper nigrum* L.) é muito suscetível à fusariose causada por *Fusarium solani* f. sp. *piperis* Alb., doença que provoca podridão das raízes, amarelecimento das folhas e ocasiona grandes perdas para cultura. O timol é um composto fenólico comum em espécies do gênero *Lippia* com atividade antimicrobiana previamente reportada. O objetivo deste trabalho foi avaliar a eficiência do óleo essencial de *L. organoides* e do timol no controle da fusariose por métodos *in vitro* e *in situ*.

**Material e Métodos.** *Lippia organoides* foi coletada na Floresta Nacional de Carajás, Parauapebas (PA). O óleo essencial foi extraído por hidrodestilação (Clevenger, 3h) e analisado por GC-FID e GC-MS<sup>1</sup> e o timol foi adquirido comercialmente (Sigma Aldrich). A atividade fungicida foi avaliada pelo método de diluição em ágar<sup>2</sup> e as interações entre o timol e a enzima  $\beta$ -glicosidase existente na parede celular do fungo foram verificadas por docagem molecular, utilizando o programa AutoDock Vina v1.2.

**Resultados e Discussão.** O óleo essencial apresentou 60% de timol em sua composição e mostrou alta inibição do crescimento micelial de *F. solani* f. sp. *piperis* no período de sete dias com inibição de 100% na concentração de 0,75 mg.mL<sup>-1</sup>. Desta forma, o timol foi avaliado isoladamente e apresentou CI<sub>50</sub> de 0,66 mM (0,62 - 0,70), calculada por regressão não-linear. A docagem molecular mostrou que o timol apresentou baixos valores de energia de afinidade (-85,5 kJ mol<sup>-1</sup>) e distância de ligação (1,87Å), o que mostra uma forte interação com o resíduos catalíticos da  $\beta$ -glicosidase através de pontes de hidrogênio, sugerindo uma atividade muito alta. Os resultados reforçam a elaboração de produtos a base de substâncias naturais provenientes de óleos essenciais da Amazônia para o controle da fusariose em *P. nigrum*.

#### Referências.

<sup>1</sup>Adams, R. P. (2007). Identification of Essential Oil Components by Gas Chromatography /Mass Spectrometry. Allured Publishing Corporation, Carol Stream, IL, 804p.

<sup>2</sup>Taira, S., Tawata, S., Kobamoto, N., Toyama, S., & Yasuda, M.; Journal of Pesticide Science, 1994, 19, 299-304.

## **VII SBOE - Simpósio Brasileiro de Óleos Essenciais**

Ciência, Tecnologia e Inovação na Amazônia

15 a 18 de outubro de 2013

UFOPA - Universidade Federal do Oeste do Pará - Santarém - Pará

**ISBN - 978-85-66836-05-9**