UNIVERSIDADE FEDERAL DO PIAUÍ
CAMPUS PROFESSORA CINOBELINA ELVAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIAS AGRÁRIAS
MESTRADO EM CIÊNCIAS AGRÁRIAS

STEFANE DA SILVA RODRIGUES

PROPRIEDADES INSETICIDAS DO ÓLEO ESSENCIAL DE PEQUI *in natura* E EM NANOEMULSÃO CONTRA *Bemisia tabaci* MEAM1 EM SOJA E SEUS EFEITOS INIBITÓRIOS SOBRE A ACETIL-COENZIMA A CARBOXILASE

Bom Jesus – PI
2026

STEFANE DA SILVA RODRIGUES

PROPRIEDADES INSETICIDAS DO ÓLEO ESSENCIAL DE PEQUI *in natura* E EM NANOEMULSÃO CONTRA *Bemisia tabaci* MEAM1 EM SOJA E SEUS EFEITOS INIBITÓRIOS SOBRE A ACETIL-COENZIMA A CARBOXILASE

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciências Agrárias - PPGCA, Campus Professora Cinobelina Elvas - CPCE, da Universidade Federal do Piauí - UFPI, na área de concentração Produção Vegetal, como requisito para obtenção do título de Mestre em Ciências Agrárias.

Orientadora: Profa. Dra. Francisca Diana da Silva Araújo

Bom Jesus – PI

2026

FICHA CATALOGRÁFICA
Universidade Federal do Piauí
Biblioteca Setorial Campus Professora Cinobelina Elvas
Setor de Processamento Técnico

R696p Rodrigues, Stefane da Silva.
Propriedades inseticidas do óleo essencial de pequi *in natura* e em nanoemulsão contra *Bemisia tabaci* MEAM1 em soja e seus efeitos inibitórios sobre a acetil-coenzima A carboxilase / Stefane da Silva Rodrigues. -- 2026.
67 f.

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal do Piauí. Programa de Pós-Graduação em Ciências Agrárias, Bom Jesus, Piauí, 2026.
"Orientadora: Profa. Dra. Francisca Diana da Silva Araújo".

1. Ciências agrárias. 2. Docking molecular. 3. Pequi. I. Araújo, Francisca Diana da Silva. II. Título.

CDD 630

Bibliotecária: Nayra Fontinele Feijão – CRB3/1249

STEFANE DA SILVA RODRIGUES

PROPRIEDADES INSETICIDAS DO ÓLEO ESSENCIAL DE PEQUI *in natura* E EM NANOEMULSÃO CONTRA *Bemisia tabaci* MEAM1 EM SOJA E SEUS EFEITOS INIBITÓRIOS SOBRE A ACETIL-COENZIMA A CARBOXILASE

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciências Agrárias - PPGCA, do Campus Professora Cinobelina Elvas - CPCE, da Universidade Federal do Piauí - UFPI, como requisito à obtenção do título de Mestre em Ciências Agrárias.
Área de concentração: Produção Vegetal.
Linha de Pesquisa: Proteção de plantas.
Orientadora: Prof. Dra. Francisca Diana da Silva Araújo.

Aprovada em: 02 de março de 2026.

BANCA EXAMINADORA

Documento assinado digitalmente
gov.br
FRANCISCA DIANA DA SILVA ARAUJO
Data: 27/03/2026 11:57:57-0300
Verifique em https://validar.iti.gov.br

Profa. Dra. Francisca Diana da Silva Araújo (UFPI)
Orientador

Documento assinado digitalmente
gov.br
JACKSON LIMA AMARAL
Data: 20/03/2026 14:42:46-0300
Verifique em https://validar.iti.gov.br

Prof. Dr. Jackson Lima Amaral (UFPI)
Examinador Externo ao Programa

Documento assinado digitalmente
gov.br
KATYUSCYA VELOSO LEAO
Data: 20/03/2026 17:12:44-0300
Verifique em https://validar.iti.gov.br

Profa. Dra. Katyuscya Veloso Leão (UFOB)
Examinadora Externa ao Programa

A Deus, por ser essencial em minha vida e autor da minha história, por nunca me deixar desistir e por me proteger, iluminar e guiar meus passos, e à minha família, pelo apoio constante.

Dedico.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus por estar presente em todos os momentos da minha vida e por me guiar até aqui, concedendo-me força e coragem para superar todos os desafios.

À Coordenação e aos professores do Programa de Pós-Graduação em Ciências Agrárias do *Campus* Professora Cinobelina Elvas (UFPI/CPCE), pela oportunidade e pela formação como Mestra em Ciências Agrárias.

À minha orientadora, Profa. Dra. Francisca Diana da Silva Araújo, pelo incentivo, apoio e palavras de encorajamento, bem como por todos os ensinamentos e conselhos ao longo desta trajetória.

Ao grupo de pesquisa em Ecologia Química Aplicada do *Campus* Professora Cinobelina Elvas, ao Laboratório de Geoquímica Orgânica e ao Laboratório de Automontagem Supramolecular do *Campus* Petrônio Portella, em Teresina, pela contribuição na execução deste trabalho.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), pela concessão da bolsa de estudos.

À minha família, por sempre acreditar em meus sonhos e estar ao meu lado, apoiando-me na busca por realizá-los. Em especial, ao meu avô *in memoriam*, ao meu pai Nilson e à minha mãe Elivânia.

À minha colega Maria Luiza de Sousa Neta, por todo o apoio, parceria e colaboração durante a execução desta pesquisa.

Aos meus colegas de universidade, pelo apoio ao longo do período do mestrado, e a todos os meus amigos que compartilharam comigo os desafios, frustrações e vitórias.

À banca examinadora, por aceitar o convite e pelas valiosas contribuições.

A todos que, de forma direta ou indireta, me apoiaram ao longo do curso e contribuíram para a minha formação acadêmica.

RESUMO

O pequi, *Caryocar brasiliense* Camb. é uma espécie nativa do Cerrado brasileiro, cujo óleo essencial ainda é pouco explorado quanto às suas propriedades inseticidas. Nesse contexto, este estudo teve como objetivo desenvolver e avaliar a eficácia inseticida de nanoemulsões contendo óleo essencial da polpa do fruto de pequi sobre *Bemisia tabaci* MEAM1 em folhas de soja e realizar o estudo do seu mecanismo de ação via docking molecular. A análise química revelou predominância de ésteres, com o hexanoato de etila o composto majoritário (92,82±0,56%). A nanoemulsão apresentou eficácia estatisticamente semelhante ao inseticida sintético 24 h após a aplicação, nas concentrações de 10000 e 20000 ppm, sem causar fitotoxicidade, enquanto o óleo essencial *in natura* provocou efeitos fitotóxicos na maior concentração. As concentrações letais para reduzir o número de indivíduos em 50% (CL_{50}) da nanoemulsão foram de 12368,0, 7162,8, 5364,9 e 3251,6 ppm após 48, 72, 96 e 120 h de exposição, respectivamente, e para o óleo essencial *in natura* os valores de CL_{50} foram de 12617,5, 1102,3 711,2 e 253,5 ppm, indicando aumento da toxicidade ao longo do tempo de exposição. Análises de *docking molecular* indicaram interação do hexanoato de etila com a enzima acetil-CoA carboxilase, sugerindo interferência na biossíntese lipídica como possível mecanismo de ação inseticida. Esses resultados demonstram o potencial inseticida do óleo essencial de pequi e evidenciam a nanoemulsificação como uma estratégia promissora para o desenvolvimento de formulações mais seguras, estáveis e eficazes no manejo sustentável de *B. tabaci*.

Palavras-chave: *Docking molecular*, Pequi, Produtos naturais, Nanoestruturas.

ABSTRACT

Pequi, *Caryocar brasiliense* Camb., is a native species of the Brazilian Cerrado, whose essential oil is still poorly explored regarding its insecticidal properties. In this context, this study aimed to develop and evaluate the insecticidal efficacy of nanoemulsions containing essential oil from pequi fruit pulp against *Bemisia tabaci* MEAM1 on soybean leaves and to study its mechanism of action via molecular docking. Chemical analysis revealed a predominance of esters, with ethyl hexanoate as the major compound (92.82±0.56%). The nanoemulsion showed statistically similar efficacy to the synthetic insecticide 24 h after application, at concentrations of 10,000 and 20,000 ppm, without causing phytotoxicity, while the raw essential oil caused phytotoxic effects at higher concentrations. The lethal concentrations to reduce the number of individuals by 50% (LC_{50}) of the nanoemulsion were 12368.0, 7162.8, 5364.9, and 3251.6 ppm after 48, 72, 96, and 120 h of exposure, respectively, and for the essential oil in its natural state, the LC_{50} values were 12617.5, 1102.3, 711.2, and 253.5 ppm, showing a decrease in the increase in toxicity over the exposure time. Molecular docking analyses indicated an interaction of ethyl hexanoate with the enzyme acetyl-CoA carboxylase, providing interference in lipid biosynthesis as a possible insecticidal mechanism of action. These results demonstrate the insecticidal potential of pequi essential oil and highlight nanoemulsification as a promising strategy for developing safer, more effective, and efficient formulations for the sustainable management of *B. tabaci*.

Keywords: *Molecular docking*, Nanostructures, Pequi, Natural products.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Estratégia experimental..... 13

Figura 2 - Classificação taxonômica de *Caryocar brasiliense*..... 14

Figura 3 - Adultos de *Bemisia tabaci*..... 21

Figura 4 - Curvas dose-resposta para mortalidade (%) de adultos de *Bemisia tabaci* MEAM1 ao longo de 120h após o tratamento de folhas de soja com óleo essencial da polpa de *Caryocar brasiliense* e nanoemulsão em diferentes concentrações..... 39

Figura 5 - Mortalidade (%) de adultos de *Bemisia tabaci* MEAM1 24 h após o tratamento de folhas de soja com óleos essenciais e nanoemulsões da polpa de *Caryocar brasiliense*..... 40

Figura 6 - Efeitos fitotóxicos em folhas de soja observados 24 h após o tratamento com óleo essencial da polpa de *Caryocar brasiliense* e a nanoemulsão a 20.000 ppm. 41

Figura 7 - Mortalidade (%) de adultos de *Bemisia tabaci* MEAM1 48 h após o tratamento de folhas de soja com óleos essenciais e nanoemulsões da polpa de *Caryocar brasiliense*..... 42

Figura 8 - Mortalidade (%) de adultos de *Bemisia tabaci* MEAM1 72 h após o tratamento de folhas de soja com óleos essenciais e nanoemulsões da polpa de *Caryocar brasiliense*..... 43

Figura 9 - Mortalidade (%) de adultos de *Bemisia tabaci* MEAM1 96 h após o tratamento de folhas de soja com óleos essenciais e nanoemulsões da polpa de *Caryocar brasiliense*..... 45

Figura 10 - Mortalidade (%) de adultos de *Bemisia tabaci* MEAM1 120 h após o tratamento de folhas de soja com óleos essenciais e nanoemulsões da polpa de *Caryocar brasiliense*..... 46

Figura 11 - *Blind docking* entre ACC e hexanoato de etila. B, C e D são rotações de 90° ao redor de um eixo central imaginário da proteína..... 49

Figura 12 - *Docking molecular* direcionado do hexanoato de etila no primeiro possível sítio de interação, domínio carboxil transferase (CT), da enzima ACC..... 51

Figura 13 - *Docking molecular* direcionado do hexanoato de etila no segundo possível sítio de interação, domínio responsável pela carboxilação da biotina (BC), da enzima Acetil-CoA Carboxilase (ACC)..... 52

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Tipos de emulsões..... 19
Tabela 2 - Composição química do óleo essencial dos frutos de *Caryocar brasiliense*..... 36
Tabela 3 - Análise por DLS da nanoemulsão carregada com óleo essencial de frutos de C*aryocar brasiliense* em diferentes doses após 1 e 30 dias de preparação..... 37
Tabela 4 - Escores de docking molecular obtidos no blind docking e nos dockings direcionados..... 50

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO GERAL..... 11

2 ESTRATÉGIA EXPERIMENTAL..... 13

3 CAPÍTULO 1: REFERÊNCIAL TEÓRICO..... 14

3.1 *Caryocar brasiliense*..... 14

3.2 Óleos essenciais no controle de pragas agrícolas..... 17

3.3 Nanoemulsão..... 19

3.4 *Bemisia tabaci* MEAM1..... 21

REFERÊNCIAS..... 23

4 CAPÍTULO 2: INSECTICIDAL PROPERTIES OF *Caryocar brasiliense* CAMB. FRUIT ESSENTIAL OILS AND NANOEMULSIONS AGAINST *Bemisia tabaci* MEAM1 ON SOYBEAN PLANTS AND THEIR INHIBITORY EFFECTS ON ACETYL-COENZYME A CARBOXYLASE..... 30

RESUMO..... 30

4.1 Introdução..... 31

4.2 Material e métodos..... 33

4.2.1 Material botânico..... 33

4.2.2 Extração e análise química do óleo essencial..... 33

4.2.3 Preparação e caracterização das nanoemulsões..... 33

4.2.4 Criação de *Bemisia tabaci* e bioensaio de toxicidade..... 34

4.2.5 Preparação das estruturas e *docking molecular*..... 35

4.3 Resultados e discussão..... 35

4.3.1 Composição química do óleo essencial da polpa dos frutos de *C. brasiliense*..... 35

4.3.2 Nanoemulsão de óleo essencial da polpa dos frutos de *C. brasiliense*..... 37

4.3.3 Toxicidade do óleo essencial da polpa dos frutos do *C. brasiliense* in natura e em nanoemulsão contra adultos de *B. tabaci*..... 38

4.3.4 *Docking molecular* Acetil-Coenzima A Carboxilase (ACC) e hexanoato de etila..... 48

4.5 Conclusões..... 54

REFERÊNCIAS..... 54

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS E PERSPECTIVAS FUTURAS..... 60

APÊNDICES..... 61

1 INTRODUÇÃO GERAL

O setor de óleos essenciais tem apresentado crescimento expressivo em escala global, impulsionado pela crescente demanda por produtos naturais nos setores agrícola, farmacêutico e alimentício. Estimativas indicam que a produção mundial poderá atingir aproximadamente 400 mil toneladas até 2025, com taxa média de crescimento anual de cerca de 9,0% (Research and Markets, 2025). Esse cenário reflete o interesse crescente por alternativas sustentáveis aos insumos químicos convencionais.

Os óleos essenciais são misturas complexas de compostos voláteis, principalmente monoterpenos, sesquiterpenos e compostos fenólicos, produzidos como metabólitos secundários de plantas. Diversos estudos têm demonstrado a eficácia desses compostos no controle de insetos-praga, com taxas de mortalidade frequentemente superiores a 60%, dependendo da espécie alvo e da concentração utilizada (Pavela; Benelli, 2016; Isman, 2020b). Especificamente para mosca branca, *Bemisia tabaci* Middle East-Asia Minor 1 (MEAM1), pesquisas conduzidas em condições controladas evidenciaram que óleos essenciais de diferentes espécies vegetais podem reduzir significativamente a sobrevivência, fecundidade e desenvolvimento ninfal desse inseto, alcançando reduções populacionais (Yang *et al*., 2010; Li *et al*., 2022).

Apesar desse potencial, a aplicação direta dos óleos essenciais apresenta limitações, principalmente devido à sua elevada volatilidade, baixa solubilidade em água e suscetibilidade à degradação ambiental, fatores que reduzem sua persistência e eficiência no campo (Isman, 2006). Nesse contexto, a nanotecnologia tem sido amplamente investigada como estratégia para aumentar a estabilidade, proteger os compostos ativos e melhorar sua eficácia biológica (Albuquerque *et al*., 2022). Além disso, formulações comerciais baseadas em óleos essenciais vêm ganhando espaço em mercados consolidados, como Canadá, Estados Unidos e países europeus, impulsionadas pela demanda por sistemas agrícolas mais sustentáveis (Isman; Miresmailli; Machial, 2011). Esse cenário reforça a importância do desenvolvimento de tecnologias semelhantes no Brasil, visando a agregação de valor aos recursos naturais e ao avanço no campo dos inseticidas botânicos.

Entre as espécies vegetais com potencial para aplicação no manejo de insetos-praga, destaca-se o pequi, *Caryocar brasiliense* Camb., conhecido como pequi, uma espécie arbórea nativa do Cerrado do Brasil e de elevada relevância socioeconômica para comunidades agroextrativistas. Seus frutos apresentam composição rica em lipídeos, compostos fenólicos, carotenoides e outros metabólitos secundários (Batista; Sousa, 2019). Esses metabólitos

desempenham papel fundamental nos mecanismos de defesa vegetal, sendo sua produção influenciada por fatores genéticos e por condições de estresse biótico e abiótico. Essas substâncias podem atuar como repelentes, antialimentares, aleloquímicos ou compostos tóxicos para herbívoros, contribuindo para a proteção da planta. Dessa forma, a presença desses compostos bioativos reforça o potencial da espécie como fonte promissora para o desenvolvimento de produtos de origem vegetal voltados ao manejo sustentável de insetos-praga (Upadhyay *et al*., 2025).

Diante desse cenário, torna-se fundamental explorar o potencial inseticida do óleo essencial de pequi, uma vez que ainda não há relatos na literatura que descrevam a atividade inseticida do óleo essencial extraído dessa espécie. A investigação de espécies vegetais nativas representa um avanço relevante no uso de produtos naturais de origem vegetal, contribuindo para a identificação de metabólitos secundários com potencial de aplicação no manejo integrado de insetos-praga e como alternativa sustentável aos inseticidas sintéticos. Além disso, o estudo do óleo essencial de pequi agrega valor a essa espécie nativa amplamente disponível na região sul do Piauí, incentivando o aproveitamento da biodiversidade regional e contribuindo para o desenvolvimento de novas estratégias de controle mais seguras e ambientalmente sustentáveis.

2 ESTRATÉGIA EXPERIMENTAL

A presente dissertação foi delineada com o objetivo de avaliar a eficácia do óleo essencial da polpa dos frutos de pequi *in natura* e em nanoemulsão no controle de *B. tabaci* MEAM1, a fim de contribuir com alternativas inovadoras e sustentáveis para o manejo integrado de pragas, com menor impacto ambiental e à saúde humana. Para isso, foi adotada uma abordagem experimental integrada, combinando extração e análise do óleo essencial, desenvolvimento biotecnológico de formulações, bioensaios de toxicidade e estudos de *docking molecular* para investigação de mecanismos de ação.

A estratégia experimental incluiu: (I) coleta dos frutos de pequi, seguida da extração do óleo essencial; (II) análise química do óleo essencial; (III) desenvolvimento e caracterização das nanoemulsões à base do óleo essencial; (IV) bioensaios de toxicidade contra *B. tabaci* MEAM1; (V) estudos de *docking molecular*.

As etapas I a V foram realizadas durante o período de iniciação científica da autora, entre setembro/2023 a agosto/2024 (Figura 1). Posteriormente, durante o mestrado, foram realizadas as etapas complementares, incluindo os processamentos dos dados e as análises estatísticas dos dados, bem como os estudos de *docking molecular*, consolidando de forma integrada os resultados apresentados nesta dissertação.

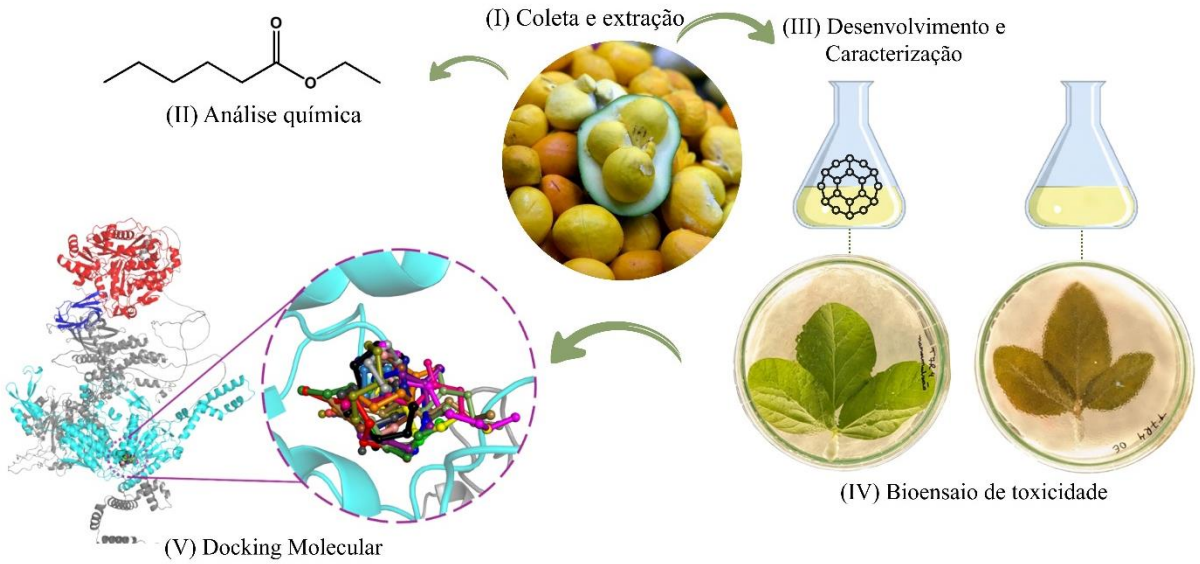


Figura 1 - Estratégia experimental.

3 CAPÍTULO 1

REFERENCIAL TEÓRICO

3.1 *Caryocar brasiliense*

Caryocar brasiliense Camb., conhecido popularmente como pequizeiro, é uma espécie arbórea nativa e emblemática do Cerrado brasileiro, pertencente à família Caryocaraceae. Trata-se de uma das espécies mais representativas desse bioma, apresentando ampla distribuição no Brasil Central, com ocorrência frequente em áreas de vegetação savânica, campos cerrados e cerradões (Figura 2). O pequizeiro destaca-se por sua elevada importância ecológica, cultural e econômica, sendo considerado um recurso estratégico para populações tradicionais e para a conservação do Cerrado (Aquino; Silva; Souza, 2023).

- Reino: Plantae
- Filo: Tracheophyta
- Classe: Magnoliopsida
- Ordem: Malpighiales
- Família: Caryocaraceae
- Gênero: *Caryocar*
- Espécie: *Caryocar brasiliense* Cambess.

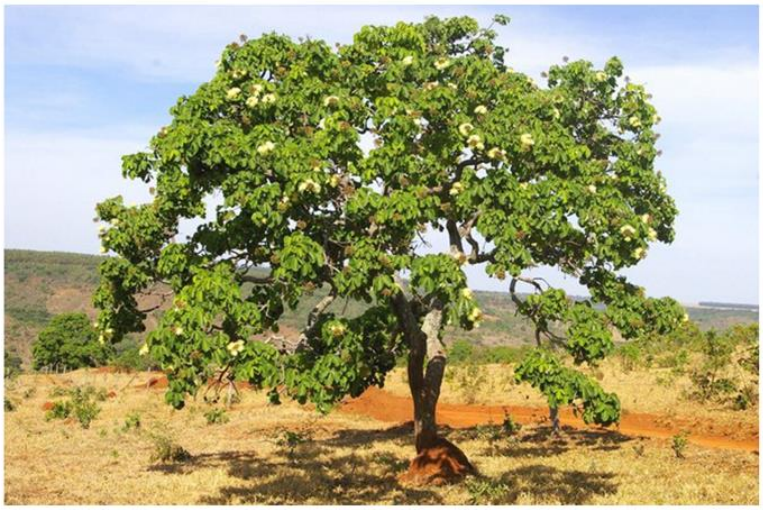


Figura 2 - Classificação taxonômica de *Caryocar brasiliense*. Fonte: Rebrotar Plantas, 2026.

O pequizeiro é uma espécie adaptada a ambientes com solos de baixa fertilidade natural, geralmente ácidos e com baixos teores de nutrientes, característica típica do Cerrado. Essa adaptação reflete sua plasticidade fisiológica, que permite o estabelecimento e desenvolvimento mesmo sob condições edáficas e climáticas restritivas. A espécie pode ocorrer de forma isolada ou formar agrupamentos naturais, com densidade populacional variável conforme o histórico de uso do solo, regime de fogo e condições ambientais locais (Aquino; Silva; Souza, 2023).

Caryocar brasiliense apresenta porte arbóreo, podendo atingir entre 6 e 12 metros de altura, com tronco tortuoso, casca espessa e copa ampla. Essas características morfológicas conferem resistência a estresses ambientais, como déficit hídrico e fogo, comuns no Cerrado.

As folhas são compostas, trifolioladas, com folíolos coriáceos, o que contribui para a redução da perda de água por transpiração, um importante mecanismo adaptativo em ambientes sazonais. Do ponto de vista fisiológico, o pequizeiro apresenta estratégias eficientes de uso da água e tolerância à seca, com sistemas radiculares profundos que favorecem o acesso à água em camadas mais profundas do solo. Além disso, a espessura da casca atua como proteção térmica e mecânica, aumentando a sobrevivência da espécie após eventos de fogo, recorrentes no bioma Cerrado (Santos; Vieira; Agostini-Costa, 2013).

A frutificação do *C. brasiliense* ocorre predominantemente entre os meses de janeiro e março, embora possam ser observados frutos fora desse período, dependendo das condições climáticas e regionais (Lima; Silva; Ferreira, 2007). Os frutos são drupas globosas, com mesocarpo carnoso e oleaginoso, envolvendo uma semente protegida por um endocarpo espinhoso, característica marcante da espécie. A fenologia reprodutiva do pequizeiro está diretamente relacionada ao regime de chuvas do Cerrado, o que influencia tanto a produção quanto a qualidade dos frutos. Essa relação climática reforça a importância da espécie como indicadora ecológica e como recurso sazonal para a fauna e para as populações humanas locais.

Os frutos do pequi e seus derivados são amplamente comercializados no Cerrado brasileiro, sendo utilizados na culinária regional, na extração de óleo e em diferentes segmentos industriais. O óleo extraído da polpa apresenta elevado teor de ácidos graxos, carotenoides e compostos bioativos, o que tem despertado crescente interesse das indústrias alimentícia, cosmética e farmacêutica (Santos; Vieira; Agostini-Costa, 2013). Estudos recentes demonstram o potencial do óleo fixo (azeite) extraído da polpa do pequi na formulação de produtos inovadores (Ombredane *et al*., 2020; Pinheiro *et al*., 2022; Pereira *et al*., 2025). O óleo fixo da polpa de *C. brasiliense*, por exemplo, foi utilizado em formulações cosméticas encapsulado em lipossomas liofilizados, com o objetivo de aumentar sua estabilidade e potencializar seus benefícios funcionais, resultando em melhora da hidratação da pele e efeitos antienvelhecimento, além de elevada estabilidade e manutenção das propriedades funcionais, reforçando o valor agregado dessa matéria-prima vegetal para aplicações cosméticas (Kakuda; Campos; Oliveira, 2024).

O pequi apresenta propriedades farmacológicas relevantes, incluindo efeitos analgésicos e anti-inflamatórios, associados à presença de compostos fenólicos, carotenoides e ácidos graxos bioativos (Roesler *et al*., 2008; Jorge *et al*., 2020). Fracasso *et al*. (2023) demonstraram, por meio de ensaios experimentais, que o resíduo da polpa *C. brasiliense* exibem atividade significativa na modulação de processos inflamatórios, reforçando seu potencial terapêutico. Estudos demonstraram que o *Caryocar brasiliense* apresenta alta atividade

antioxidante, associada à presença de compostos bioativos, como ácido gálico, e derivados da quercetina, os quais contribuem para a inibição de processos oxidativos. Essa atividade foi verificada em extratos obtidos a partir de diferentes partes do fruto, sendo utilizadas a polpa, a casca e as sementes, evidenciando que os compostos antioxidantes estão distribuídos em todo o fruto e reforçando seu potencial como fonte natural de substâncias bioativas (Roesler *et al*., 2008).

A composição química complexa do óleo fixo do *Caryocar brasiliense*, aliada à sua adaptação ecológica e ampla disponibilidade no Cerrado, torna a espécie uma fonte promissora de compostos bioativos com aplicação em diferentes áreas, incluindo agricultura, farmacologia e biotecnologia. O elevado teor de metabólitos secundários da espécie *C. brasiliense* sugere potencial para o desenvolvimento de produtos naturais com atividade inseticida, antioxidante e antimicrobiana, especialmente quando associados a tecnologias inovadoras, como a nanoencapsulação, que pode aumentar a estabilidade e eficácia desses compostos. Os óleos essenciais de *Caryocar brasiliense* Camb., obtidos a partir da extração das folhas coletadas no município de Crato, estado do Ceará, foram avaliados, em condições de laboratório, quanto ao seu efeito larvicida no controle de *Aedes aegypti*, apresentando ação inseticida, porém com baixa eficiência (Azevedo *et al*., 2023).

O óleo essencial do mesocarpo (polpa) dos frutos de *C. brasiliense* apresentou atividade nematicida, promovendo mortalidade de até 82% de juvenis de *Meloidogyne javanica*, efeito associado, principalmente, à presença de ésteres e monoterpenos (Marques *et al*., 2023). O óleo fixo da *C. brasiliense*, reduziu a viabilidade de ovos e a emergência de adultos de *Callosobruchus maculatus* (Pereira *et al*., 2008), bem como demonstrou toxicidade contra ninfas de *Aphis craccivora* em feijão-fava (Avelino *et al*., 2019) e adultos de *Sitophilus zeamais* em grãos de milho (Coitinho *et al*., 2006). Extratos vegetais de *C. brasiliense* obtidos a partir de diferentes estruturas da planta também têm apresentado atividade inseticida. Extratos aquosos das cascas do fruto mostraram eficiência no controle de *Spodoptera frugiperda* (Souza *et al*., 2018). Extratos hidroalcoólicos obtidos a partir de folhas de *C. brasiliense* foram avaliados quanto ao seu potencial inseticida sobre insetos-praga de importância agrícola (Moraes *et al*., 2020), afetando parâmetros relacionados à sobrevivência e desenvolvimento dos insetos avaliados. Esses resultados indicam que metabólitos secundários presentes nas folhas da espécie apresentam propriedades inseticidas relevantes, reforçando seu potencial para aplicação no manejo de pragas.

3.2 Óleos essenciais no controle de pragas agrícolas

A ISO (*International Standard Organization*) define óleos essenciais como produto obtido a partir de matéria-prima natural de origem vegetal por destilação de água ou vapor, por processamento mecânico de cascas cítricas ou por destilação a seco, Simões e Spitzer (2003). Os óleos essenciais consistem em uma combinação complexa de substâncias voláteis, lipofílicas, geralmente odoríferas e líquidas, com aparência oleosa à temperatura ambiente, contudo, a volatilidade, uma propriedade deste conjunto de substâncias, o diferencia dos óleos fixos (Dhifi *et al*., 2016).

Os óleos essenciais podem ser produzidos em todos os órgãos da planta, apresentando variação na sua composição química, de acordo com o local que foi produzido. O estágio de desenvolvimento da planta no momento da colheita influencia significativamente na composição dos óleos essenciais, os quais podem produzir compostos específicos em maiores quantidades (Ni *et al*., 2021). Essa composição varia desde hidrocarbonetos terpênicos, álcoois simples terpênicos, ácidos orgânicos, aldeídos, cetonas, fenóis, éteres, ésteres, óxidos, peróxidos, furanos, lactonas, cumarinas e compostos sulfurados. Os terpenos são categorizados conforme o número de unidades de isopreno presentes em suas estruturas, o que influencia suas propriedades e eficácia no controle de pragas (Jyotsna; Kumar; Sharma, 2024).

Os óleos essenciais desempenham importantes funções nas plantas, atuando tanto em defesas diretas quanto indiretas contra herbívoros e patógenos. Podem atuar por contato, ingestão e fumigação e provocam vários efeitos nos insetos-praga como repelência, inibidores de crescimento, inibidores de oviposição e deformações (Hikal *et al*., 2017). O uso dos óleos essenciais como inseticida botânico aumentou consideravelmente devido à sua popularidade em cultivos orgânicos e consumidores ambientalmente conscientes. No entanto, apesar dos óleos essenciais serem altamente eficazes como pesticidas, sua natureza volátil, baixa solubilidade em água, degradação e estabilidade limitam sua aplicação, sendo degradados mais facilmente no meio ambiente do que os compostos sintéticos (Koul; Walia; Dhaliwal, 2008).

Os métodos de extração dos óleos essenciais incluem hidrodestilação, destilação a vapor, extração sólido-líquido, extração com solventes, prensagem a frio e prensagem convencional (Nabi *et al*., 2025). Dentre os métodos utilizados para a extração do óleo essencial a hidrodestilação se destaca (Kant; Kumar, 2022), pois é extensivamente utilizada em ambientes industriais, devido à sua eficiência, baixo custo e fácil implementação. Além disso, a destilação utilizando o aparelho Clevenger é uma técnica que tem se destacado, proporcionando resultados excelentes, na qual o material vegetal é aquecido juntamente com

água, fazendo com que óleo essencial seja arrastado juntamente com o vapor d'água (Preedy, 2015).

Os óleos essenciais vegetais apresentam atividade inseticida significativa contra insetos-praga, atuando por toxicidade de contato, efeito repelente e interferência no desenvolvimento (Isman, 2006; Regnault-Roger; Vincent; Arnason, 2012; Pavela, 2015). Esses efeitos estão relacionados à presença de compostos voláteis, como monoterpenos e sesquiterpenos, que atuam no sistema nervoso e respiratório dos insetos, provocando paralisia, mortalidade e redução do desenvolvimento.

Bomfim *et al*. (2025) investigaram a atividade inseticida de óleos essenciais extraídos de *Syzygium aromaticum*, *Cymbopogon citratus*, *Cordia verbenacea*, *Callistemon* sp., *Baccharis dracunculifolia* e *Schinus terebinthifolius* sobre diferentes estágios de desenvolvimento de *B. tabaci* MEAM1, incluindo ovos, ninfas e adultos. Além disso, os autores avaliaram o potencial repelente e o efeito na inibição da oviposição em adultos. Os resultados demonstraram que os óleos essenciais de *S. aromaticum* e *C. citratus* se destacaram em relação aos demais, apresentando elevada atividade ovicida, além de forte efeito repelente e significativa redução na oviposição, evidenciando seu potencial para o manejo dessa praga. Os óleos essenciais extraídos das partes aéreas de *Thymus pulegioides* e *Artemisia absinthium* foram avaliados quanto à sua atividade sobre adultos de *B. tabaci* MEAM1, por meio de bioensaios comportamentais utilizando olfatômetro. Os resultados demonstraram efeito repelente significativo, especialmente para o óleo essencial de *T. pulegioides*, além de toxicidade por contato nas concentrações mais elevadas. Esses achados evidenciam o potencial desses óleos essenciais como alternativa no manejo dessa praga (Li *et al*., 2022).

Apesar dos óleos essenciais apresentarem atividades inseticidas promissoras, a aplicação em campo ainda é limitada por suas propriedades físico-químicas, como a baixa solubilidade em água, elevada volatilidade e suscetibilidade à oxidação, fatores que reduzem sua estabilidade e persistência em condições de campo (Isman, 2006). Essas limitações comprometem a eficácia e dificultam sua utilização em larga escala. Além disso, é essencial avaliar os possíveis efeitos tóxicos sobre organismos não alvo, como polinizadores e inimigos naturais, a fim de garantir a segurança ambiental. Nesse contexto, torna-se necessário o desenvolvimento de formulações que aumentem a estabilidade, proteja os compostos contra a degradação e promovam uma liberação mais eficiente dos princípios ativos, como aquelas baseadas em sistemas de encapsulação, com destaque para as nanoemulsões (Isman, 2020a).

3.3 Nanoemulsão

As nanoemulsões são sistemas coloidais cineticamente estáveis constituídos por duas fases imiscíveis, geralmente óleo e água, estabilizadas por surfactantes, apresentando gotículas com diâmetros médios entre 20 e 500 nm (Tabela 1). Essas estruturas apresentam vantagens significativas, como aumento da solubilidade em água de compostos hidrofóbicos, maior área superficial, melhor dispersão e maior eficiência de penetração dos compostos ativos, quando comparadas a emulsões convencionais (Gupta *et al*., 2020; Mustafa; Hussein, 2020).

Tabela 1 - Tipos de emulsões

Característica	Emulsão Convencional	Micro Emulsão	Nanoemulsão
Tamanho da gota	1 a 100 micrômetros (µm)	10 a 100 nanômetros (nm)	20 a 200 nanômetros (nm)
Visual	Opaco, leitoso	Transparente ou levemente opalescente	Translúcido a levemente leitoso
Estabilidade	Cinética baixa, suscetível à separação (Cremeação, coalescência)	Transparente ou levemente opalescente	Cinética alta, estável por meses ou anos, mas não indefinidamente
Vantagens	Fácil de formular, baixo custo	Alta solubilização de ativos, estabilidade total, penetração facilitada	Alta penetração, estabilidade contra sedimentação, sensorial sofisticado

Fonte: https://www.linkedin.com/posts/roberta-menesess_microemuls%C3%B5es-nano-emuls%C3%B5es-e-emuls%C3%B5es-convencionais-activity-7361411215362797568-kF0F/?originalSubdomain=pt

No contexto da nanobiotecnologia aplicada à agricultura, as nanoemulsões têm se destacado por possibilitarem uma liberação mais controlada e direcionada dos compostos bioativos, favorecendo interações mais eficientes entre o ingrediente ativo e os sistemas biológicos. Essa característica contribui para o aumento da eficácia inseticida, redução da dose necessária e minimização de efeitos adversos sobre organismos não alvo, alinhando-se aos princípios do manejo integrado de pragas e da agricultura sustentável (Aswathanarayan; Vittal, 2019).

Os métodos de preparo das nanoemulsões podem ser classificados, de modo geral, em métodos de alta energia e métodos de baixa energia, os quais se diferenciam principalmente pela fonte de energia utilizada para a formação das gotículas nanométricas. Os métodos de alta energia envolvem a aplicação de forças mecânicas externas intensas, como homogeneização de alta pressão, ultrassonicação e microfluidização, que promovem a fragmentação das gotículas da fase dispersa até a escala nanométrica. Embora eficazes, esses métodos demandam equipamentos específicos, maior consumo energético e custos elevados, podendo ainda causar

degradação térmica ou oxidativa de compostos sensíveis, como óleos essenciais (El-Messery; Altayeb; El-Sayed, 2020).

Em contraste, os métodos de baixa energia, baseiam-se na formação espontânea de nanoestruturas a partir de alterações na composição do sistema ou nas condições termodinâmicas, sem a necessidade de equipamentos complexos. Esses métodos exploram fenômenos físico-químicos, como a inversão de fases (Phase Inversion Temperature – PIT ou Phase Inversion Composition – PIC) e a autoemulsificação, permitindo a obtenção de nanoemulsões com menor custo, maior reprodutibilidade e menor risco de degradação dos compostos ativos (Mustafa; Hussein, 2020; El-Messery; Altayeb; El-Sayed, 2020). A utilização de métodos de baixa energia é particularmente vantajosa para a nanoencapsulação de óleos essenciais, uma vez que esses compostos apresentam alta volatilidade e sensibilidade a fatores ambientais, como luz e temperatura. Assim, a nanoemulsificação contribui para aumentar a estabilidade físico-química e prolongar a atividade biológica dos óleos essenciais, ampliando seu potencial de uso como bioinseticidas (Gupta *et al*., 2020).

As pesquisas envolvendo nanoemulsões formuladas com óleos essenciais têm avançado significativamente, especialmente no contexto do controle de insetos-praga, destacando-se como alternativas ecologicamente seguras aos inseticidas sintéticos. Segundo Abdelmaksoud, El-sayed e Hassan (2024), nanoemulsões à base de óleos essenciais de *Salvia officinalis* e *Melissa officinalis* apresentaram elevada atividade inseticida contra *Aphis craccivora* e *Liriomyza trifolii*, tanto em ensaios *in vitro* quanto em condições de campo, evidenciando o potencial dessas nanoformulações como ferramentas eficazes no manejo sustentável de pragas.

Perinelli *et al*. (2022) ressaltaram que, apesar do número ainda limitado de estudos, as nanoemulsões têm demonstrado melhoria significativa na atividade inseticida de óleos essenciais. Em seus experimentos, nanoemulsões formuladas com óleos essenciais de *Bunium persicum* e *Ziziphora clinopodioides* apresentaram maior eficácia contra larvas e pupas de *Culex quinquefasciatus* em bioensaios *in vitro*, levando os autores a concluírem que essas formulações são candidatas promissoras para aplicação comercial como pesticidas naturais. Resultados semelhantes foram observados por Hashem, Ramadan e El-Banna (2018), que desenvolveram nanoemulsões à base de óleo essencial de *Pimpinella anisum* visando o controle de *Tribolium castaneum*, importante praga de produtos armazenados. Os autores relataram elevada mortalidade dos adultos e alterações morfológicas nos insetos tratados, indicando que a nanoemulsificação contribuiu para potencializar o modo de ação inseticida do óleo essencial.

De forma complementar, Giunti; Campani; Messori (2022) avaliaram nanoemulsões formuladas com óleos essenciais de *Carlina acaulis*, *Mentha longifolia* e *Hazomalania voyronii*

contra adultos de *Sitophilus oryzae* em grãos armazenados. Os resultados demonstraram que as nanoemulsões apresentaram excelente estabilidade físico-química após um ano de armazenamento, além de atividade inseticida significativa, reforçando o potencial dessas nanoformulações como inseticidas sustentáveis para uso agrícola.

3.4 *Bemisia tabaci* MEAM1

Um dos principais desafios fitossanitários na cultura da soja é o ataque de insetos pragas, entre eles a mosca-branca (*Bemisia tabaci* Gennadius), que tem se tornado cada vez mais problemático nas lavouras de soja ao redor do mundo (Barro *et al*., 2011). O ataque da mosca-branca à soja pode comprometer a fotossíntese, a condutância estomática e a eficiência no uso da água, pois o inseto extrai nutrientes dos tecidos foliares e secreta melada, promovendo o desenvolvimento de fuligem que impede a interceptação de luz e reduz a eficiência fotossintética. Diferentes cultivares de soja apresentam respostas fisiológicas variadas ao ataque de *B. tabaci* (Figura 3), indicando níveis distintos de tolerância ou resistência dentro do germoplasma disponível (Schutze *et al*., 2022).



Figura 3 - Adultos de *Bemisia tabaci*. Fonte: Rebrotar Plantas (2026).

Bemisia tabaci (Gennadius) (Hemiptera: Aleyrodidae) possui em torno de 43 espécies crípticas, ou seja, isoladas reprodutivamente entre si (Barro *et al*., 2011; Tay *et al.,* 2017). O complexo The Middle East-Asia Minor 1 (MEAM1 ou biótipo B) e Mediterranean (MED ou biótipo Q) são considerados as espécies mais invasivas com uma ampla gama de hospedeiros de plantas (Barro *et al*., 2011). Como grupo, possuem em torno de 36 gêneros de plantas diferentes servindo como hospedeiros, resistência relatada para 56 inseticidas diferentes e capacidade de transmitir mais de 100 vírus (Stansly; Naranjo, 2010; Willis, 2017). *B. tabaci* é

uma praga polífaga, não apenas atua como vetor de vírus, mas também desencadeia distúrbios fisiológicos nas plantas, resultando em danos significativos (Hsieh; Wang; Lin, 2014). Os ovos e as fases imaturas frequentemente passam despercebidos na face abaxial das folhas, o que pode facilitar a sua entrada em outros países.

Os problemas relacionados a *B. tabaci* estão associados a implantação de práticas agrícolas e a altas temperaturas. Em ambientes quentes, a *B. tabaci* tem o ciclo de vida reduzido, reproduzindo mais rapidamente (Brown; Frommer; Haynes, 1995). Esse inseto passa por quatro fases distintas em seu ciclo de vida: na Fase I, os adultos dedicam aproximadamente dois dias para alimentação e oviposição; na Fase II, ocorre o estádio móvel, com duração de sete dias; na Fase III, a transição ninfal do segundo para o terceiro instar é realizada ao longo de 12 dias; na Fase IV, o estádio ninfal de quarto instar se estende por 18 dias (Estrada-Hernández; Valdez-Carrasco; Ramírez, 2009). A longevidade do adulto depende das condições ambientais, em média as fêmeas vivem em torno de 62 dias, podendo variar entre 38 a 74 dias, enquanto que os machos têm um tempo de vida mais curto, podendo variar de 9 a 17 dias (Villas Boas; Branco, 2009).

Nas últimas décadas, o controle químico de *Bemisia tabaci* tem sido amplamente baseado no uso de diferentes classes de inseticidas sintéticos, que atuam em alvos fisiológicos específicos, principalmente no sistema nervoso central e em processos metabólicos essenciais do inseto. Nos últimos dez anos, os neonicotinoides têm se destacado como os principais compostos utilizados, especialmente imidacloprido e tiametoxam, os quais são amplamente empregados em pulverizações foliares e tratamento de sementes devido à sua elevada eficácia e ação sistêmica (Nauen; Denholm, 2005; Bass *et al*., 2015). Esses inseticidas atuam como agonistas dos receptores nicotínicos de acetilcolina, promovendo estimulação contínua, paralisia e morte do inseto, sendo altamente eficientes contra insetos sugadores (Nauen; Denholm, 2005). Apesar de sua ampla eficiência, estudos indicam que a exposição prolongada a esses compostos pode causar efeitos adversos à saúde humana, incluindo comprometimento cognitivo, devido à sua ação neurotóxica (Wei *et al*., 2024).

Além dos neonicotinoides, os piretroides, como deltametrina e bifentrina, são utilizados no controle de *B. tabaci*, atuando como moduladores dos canais de sódio dependentes de voltagem, o que provoca hiperexcitação nervosa, paralisia e morte do inseto (Soderlund, 2012). Outra classe importante inclui os organofosforados e carbamatos, como acefato, clorpirifós e metomil, que atuam por meio da inibição da enzima acetilcolinesterase, resultando no acúmulo de acetilcolina nas sinapses e consequente hiperexcitação do sistema nervoso (Ahmad; Arif; Naveed, 2010).

Inseticidas reguladores de crescimento, como piriproxifeno e buprofezina, têm sido empregados, atuando respectivamente como análogo do hormônio juvenil e inibidor da síntese de quitina, interferindo no desenvolvimento e na formação do exoesqueleto, o que impede a muda e a emergência de adultos (Ishaaya; Horowitz, 1995). Além disso, compostos como o spiromesifeno atuam como inibidores da enzima acetil-CoA carboxilase, bloqueando a biossíntese de lipídios e comprometendo funções vitais do inseto, sendo eficazes principalmente contra ninfas (Kontsedalov *et al*., 2009).

Inseticidas como o pymetrozine atuam interferindo no comportamento alimentar, afetando os órgãos sensoriais responsáveis pela sucção da seiva e levando o inseto à morte por inanição, apresentando elevada seletividade para insetos sugadores como *B. tabaci* (Barati *et al*., 2013). Esse amplo uso de inseticidas sintéticos, embora eficiente, tem resultado em sérios problemas, como a seleção de espécies resistentes, riscos à saúde humana e impactos ambientais, evidenciando a necessidade de desenvolvimento de estratégias alternativas e mais seguras para o controle dessa importante praga agrícola. Existem dois mecanismos principais que conferem resistência aos inseticidas em *B. tabaci*, a resistência no local alvo (modificação do local de ligação do inseticida) e a resistência metabólica (aumento dos níveis de enzimas metabólicas que facilitam a desintoxicação das fases I e II dos inseticidas) (Nauen; Denholm; Dennehy, 2015).

Com base em pesquisas anteriores conduzidas em diversas áreas agrícolas do Cerrado/Caatinga do Brasil, foi constatado que o uso intensivo de inseticidas resulta em resistência da *B. tabaci*, especialmente quando esses produtos são aplicados em ambientes fechados, como estufas (Guo; Liu; Li, 2014; Naveen; Chaudhury; Karthik, 2017; Dângelo; Silva; Lourenção, 2018). A capacidade da *B. tabaci* de encontrar refúgio em locais ocultos, facilita sua reprodução, tornando-a um inseto-praga de difícil controle (Barboza *et al*., 2025). Nesse contexto, torna-se evidente a necessidade de desenvolver e incorporar estratégias alternativas de controle, particularmente aquelas baseadas em produtos de origem vegetal, que possam reduzir a dependência de inseticidas sintéticos e contribuir para um manejo mais sustentável e eficiente dessa praga.

REFERÊNCIAS

ABDELMAKSOUD, M. A.; EL-SAYED, S. M.; HASSAN, H. A. Insecticidal activity of essential oil nanoemulsions against agricultural pests. **Industrial Crops and Products**, v. 203, p. 117066, 2024.

ABUBAKAR, M.; LAWAL, M.; SANI, I.; SULE, H.; MUHAMMAD, A. Whitefly (*Bemisia tabaci*) management (WFM) strategies for sustainable agriculture: A review. **Agriculture**, v. 12, n. 9, p. 1317, 2022.

AHMAD, M.; ARIF, M. I.; NAVEED, M. Dynamics of resistance to organophosphate and carbamate insecticides in the cotton whitefly *Bemisia tabaci* (Hemiptera: Aleyrodidae) from Pakistan. **Journal of Pest Science**, v. 83, n. 4, p. 409-420, 2010.

ALBUQUERQUE, P. M.; SANTOS, N. S.; FERREIRA, A. L.; ROCHA, L. P. Biotechnological applications of nanoencapsulated essential oils: A review. **Polymers**, v. 14, n. 24, p. 5495, 2022.

AQUINO, F. G.; RIBEIRO, J. F.; WALTER, B. M. T. **Pequi (*Caryocar brasiliense* Camb.): ecologia, uso e conservação no Cerrado**. Brasília: Embrapa Cerrados, 2023.

ASWATHANARAYAN, J. B.; VITTAL, R. R. Nanoemulsions and their potential in pest management. **Journal of Plant Protection Research**, v. 59, n. 1, p. 1-10, 2019.

AVELINO, L. D.; PORTELA, G. L. F.; GIRÃO, J. E. F.; MELO, L. C. J. Repelência de óleos essenciais e vegetais sobre *Aphis craccivora* na cultura do feijão-fava. **Revista Verde de Agroecologia e Desenvolvimento Sustentável**, v. 14, n. 1, p. 1-7, 2019.

AZEVEDO, F. R.; RIBEIRO, J. R.; SILVA, M. E.; COSTA, A. P. Uso de óleos essenciais de plantas da Floresta Nacional do Araripe contra *Aedes aegypti* (Diptera: Culicidae). **Brazilian Journal of Biology**, v. 83, p. e275062, 2023.

BARATI, R.; HEJAZI, M. J.; NEMATI, A. R.; GHOLAMI, M. The effects of some botanical insecticides and pymetrozine on life table parameters of silver leaf whitefly *Bemisia tabaci* Gennadius (Hemiptera: Aleyrodidae). **Pesticidi i Fitomedicina**, v. 28, n. 1, p. 47-55, 2013.

BARBOZA, L. Physiological impacts of *Bemisia tabaci* MEAM1 infestation on soybean cultivars with different levels of resistance. **Journal of Environment and Pollution**, v. 1, n. 1, p. 1-9, 2025.

BARRO, P. J.; LIU, S. S.; BOYKIN, L. M.; DINSDALE, A. B. *Bemisia tabaci*: a statement of species status. **Annual Review of Entomology**, v. 56, p. 1-19, 2011.

BASS, C.; DENHOLM, I.; WILLIAMSON, M. S.; NAUEN, R. The global status of insect resistance to neonicotinoid insecticides. **Pesticide Biochemistry and Physiology**, v. 121, p. 78-87, 2015.

BATISTA, F. O.; SOUSA, R. S. Compostos bioativos em frutos pequi (*Caryocar brasiliense* Camb.) e baru (*Dipteryx alata* Vogel) e seus usos potenciais: uma revisão. **Brazilian Journal of Development**, v. 5, n. 7, p. 9259-9270, 2019.

BOMFIM, J. P. A.; SILVA, W. D.; SANTOS, J. C.; OLIVEIRA, E. E.; PEREIRA, E. J. G.; PICANÇO, M. C. Insecticidal and behavioral effects of essential oils on *Bemisia tabaci* MEAM1. **Journal of Economic Entomology**, v. 118, n. 4, p. 1694-1701, 2025.

BROWN, J. K.; FROMMER, W. B.; HAYNES, L. Temperature effects on *Bemisia tabaci* biology. **Environmental Entomology**, v. 24, p. 1-8, 1995.

COITINHO, R. L. B. C.; OLIVEIRA, J. V.; GONDIM, M. G. C. J.; CÂMARA, C. A. G. Atividade inseticida de óleos vegetais sobre *Sitophilus zeamais* em milho armazenado. **Revista Caatinga**, v. 19, n. 2, p. 176-182, 2006.

DÂNGELO, R. A. C.; SILVA, A. G.; LOURENÇÃO, A. L. Resistência de *Bemisia tabaci* a inseticidas no Brasil. **Neotropical Entomology**, v. 47, n. 4, p. 1-10, 2018.

DHIFI, W.; BELKHIRA, S.; WANNES, W. A.; JELALI, N. Essential oils' chemical characterization and investigation of some biological activities: A critical review. **Phytotherapy Research**, v. 30, n. 2, p. 1-16, 2016.

EL-MESSERY, T. M.; ALTAYEB, M. M.; EL-SAYED, S. M. High- and low-energy methods for nanoemulsion preparation. **Journal of Food Engineering**, v. 284, p. 110073, 2020.

ESTRADA-HERNÁNDEZ, M. G.; VALDEZ-CARRASCO, J.; RAMÍREZ, C. Life cycle of *Bemisia tabaci* under controlled conditions. **Journal of Insect Science**, v. 9, p. 1-10, 2009.

FRACASSO, J. A. R.; SILVA, M. L. A.; SOUSA, R. M.; SILVA, J. F. M.; COSTA, J. G. M.; COUTINHO, H. D. M. Anti-inflammatory effect and toxicological profile of pulp residue from *Caryocar brasiliense*, a sustainable raw material. **Gels**, v. 9, n. 3, p. 234, 2023.

GIUNTI, G.; CAMPANI, E.; MESSORI, L. Stability and insecticidal activity of essential oil nanoemulsions. **Pest Management Science**, v. 78, n. 5, p. 2111-2122, 2022.

GUO, L.; LIU, Y.; LI, M. Insecticide resistance in *Bemisia tabaci* populations. **Pesticide Biochemistry and Physiology**, v. 114, p. 1-7, 2014.

GUPTA, A.; ERAL, H. B.; HATTON, T. A.; DOYLE, P. S. Nanoemulsions: formation, properties and applications. **Soft Matter**, v. 12, n. 11, p. 2826-2841, 2020.

HASHEM, A. S.; RAMADAN, M. M.; EL-BANNA, H. R. Nanoemulsions of essential oils for stored-product pest control. **Journal of Stored Products Research**, v. 77, p. 81-89, 2018.

HIKAL, W. M.; BAESHEN, R. S.; SAID-AL AHL, H. A. H. Botanical insecticide as simple extractives for pest control. **Cogent Biology**, v. 3, p. 1-16, 2017.

HSIEH, C. H.; WANG, H. Y.; LIN, C. C. Physiological disorders induced by *Bemisia tabaci* feeding. **Journal of Economic Entomology**, v. 107, n. 2, p. 1-9, 2014.

ISHAAYA, I.; HOROWITZ, A. R. Pyriproxyfen, a novel insect growth regulator for controlling whiteflies: mechanisms and resistance management. **Pesticide Science**, v. 43, n. 3, p. 227-232, 1995.

ISMAN, M. B. Bioinsecticides based on plant essential oils: a short overview. **Zeitschrift für Naturforschung C**, v. 75, n. 7-8, p. 179-182, 2020a.

ISMAN, M. B. Botanical insecticides in the twenty-first century. **Annual Review of Entomology**, v. 65, p. 233-249, 2020b.

ISMAN, M. B. Botanical insecticides, deterrents, and repellents in modern agriculture. **Annual Review of Entomology**, v. 51, p. 45-66, 2006.

ISMAN, M. B.; MIRESMAILLI, S.; MACHIAL, C. Commercial opportunities for pesticides based on plant essential oils in agriculture, industry and consumer products. **Phytochemistry Reviews**, v. 10, n. 2, p. 197-204, 2011.

JYOTSNA, D.; KUMAR, R.; SHARMA, S. Terpenoids: classification, biosynthesis and role in pest management. **Journal of Plant Protection Research**, v. 64, n. 1, p. 1-14, 2024.

KAKUDA, T. Y.; CAMPOS, P. M. B. G. M; OLIVEIRA, C. A. Development of cosmetic formulations containing pequi oil encapsulated in lyophilized liposomes. **Journal of Cosmetic Dermatology**, v. 23, n. 2, p. 1-12, 2024.

KANT, R.; KUMAR, R. Hydrodistillation techniques for essential oil extraction: advances and applications. **Journal of Applied Research on Medicinal and Aromatic Plants**, v. 28, p. 100368, 2022.

KOUL, O.; WALIA, S.; DHALIWAL, G. S. Essential oils as green pesticides: potential and constraints. **Biopesticides International**, v. 4, n. 1, p. 63-84, 2008.

LI, S.; LI, H.; ZHOU, Q.; ZHANG, F.; DESNEUX, N.; WANG, S.; SHI, L. Essential oils from two aromatic plants repel the tobacco whitefly *Bemisia tabaci*. **Journal of Pest Science**, v. 95, n. 2, p. 971-982, 2022.

LIMA, A. L. S.; SILVA, J. A.; FERREIRA, H. D. Fenologia reprodutiva de *Caryocar brasiliense* no Cerrado. **Acta Botanica Brasilica**, v. 21, n. 1, p. 95-104, 2007.

CRUZ, V. H.; SILVA, J. P.; FERREIRA, L.; OLIVEIRA, M. F. Tomato secondary metabolites as natural regulators of *Bemisia tabaci* behavior and performance: current applicability and prospects. **Frontiers in Plant Science**, v. 16, p. 1704832, 2025.

MORAIS, H. L. M. N.; FEITOSA, T. C.; RODRIGUES, J. G. M.; LIRA, M. G. S.; NOGUEIRA, R. A.; LUZ, T. R. S. A.; MIRANDA, G. S. Hydroalcoholic extract of *Caryocar brasiliense* Cambess. leaves affect the development of *Aedes aegypti* mosquitoes. **Revista da Sociedade Brasileira de Medicina Tropical**, v. 53, p. e20200176, 2020.

MARQUES, A. A.; SOUSA, B. N.; GUIMARÃES, N. N.; MARTINS, C. M.; SILVA, R. V. Chemical composition of pequi essential oil (*Caryocar brasiliense*) and nematicidal activity in the control of *Meloidogyne javanica*. **Revista Ceres**, v. 70, p. e70505, 2023.

MUSTAFA, S.; HUSSEIN, M. Z. Nanoemulsions: principles, preparation and applications in agriculture. **Journal of Controlled Release**, v. 329, p. 300-318, 2020.

NABI, F.; KHAN, A.; ZAHOOR, M.; FAZAL, H. Recent advances in extraction techniques of essential oils. **Journal of Essential Oil Research**, v. 37, n. 1, p. 1-15, 2025.

NAUEN, R.; DENHOLM, I. Resistance of insect pests to neonicotinoid insecticides: current status and future prospects. **Archives of Insect Biochemistry and Physiology**, v. 58, n. 4, p. 200-215, 2005.

NAUEN, R.; DENHOLM, I.; DENNEHY, T. J. Resistance mechanisms in *Bemisia tabaci*. **Pest Management Science**, v. 71, p. 144-152, 2015.

NAVEEN, N. C.; CHAUDHURY, S.; KARTHIK, K. Resistance development in *Bemisia tabaci*. **Crop Protection**, v. 98, p. 194-202, 2017.

NI, L.; ZHENG, J.; LIU, B.; WANG, H. Effects of harvest stage on chemical composition and biological activities of essential oils. **Industrial Crops and Products**, v. 169, p. 113636, 2021.

OMBREDANE, A. S.; SOUZA, F. R.; COSTA, A. P.; SILVA, J. M. Nanoemulsion-based systems as a promising approach for enhancing the antitumoral activity of pequi oil (*Caryocar brasiliense* Cambess.). **Journal of Drug Delivery Science and Technology**, v. 58, p. 101819, 2020.

PAVELA, R. Essential oils for the development of eco-friendly mosquito larvicides. **Industrial Crops and Products**, v. 76, p. 174-187, 2015.

PAVELA, R.; BENELLI, G. Essential oils as ecofriendly biopesticides? **Trends in Plant Science**, v. 21, n. 12, p. 1000-1007, 2016.

PEREIRA, A. C. R. L.; OLIVEIRA, J. V.; GONDIM, M. G. C. J.; CÂMARA, C. A. G. Atividade inseticida de óleos essenciais e fixos sobre *Callosobruchus maculatus* em grãos de caupi. **Ciência e Agrotecnologia**, v. 32, n. 3, p. 717-724, 2008.

PEREIRA, T. F.; SILVA, A. C.; OLIVEIRA, L. P.; SANTOS, F. R. Pequi pulp (*Caryocar brasiliense*) oil-loaded emulsions as cosmetic products for topical use. **Polymers**, v. 17, n. 2, p. 226, 2025.

PERINELLI, D. R.; PETRELLI, D.; SCALZO, S.; ROSSI, F.; BIANCHI, L. Essential oil nanoemulsions as eco-friendly insecticides. **Nanomaterials**, v. 12, n. 3, p. 451, 2022.

PINHEIRO, A. C.; SILVA, L. P.; OLIVEIRA, A. S.; COSTA, F. R. Evaluation of biocompatibility, anti-inflammatory, and antinociceptive activities of pequi oil-based nanoemulsions in in vitro and in vivo models. **Nanomaterials**, v. 12, n. 23, p. 4260, 2022.

PREEDY, V. R. (Ed.). **Essential oils in food preservation, flavor and safety**. London: Academic Press, 2015.

REBROTAR PLANTAS. PEQUI (*Caryocar brasiliense*) - muda com até 60 cm, 2026. Disponível em: https://www.rebrotarplantas.com.br/pequi. Acesso em: 11 mar. 2026.

REGNAULT-ROGER, C.; VINCENT, C.; ARNASON, J. T. Essential oils in insect control: low-risk products in a high-stakes world. **Annual Review of Entomology**, v. 57, p. 405-424, 2012.

RESEARCH AND MARKETS. Essential oils market size, share and trends analysis report by product (orange, cornmint, eucalyptus), by application (medical, food & beverages, spa & relaxation, cleaning & home), by sales channel (direct selling), by region, and segment forecasts, 2025-2033. 2025. Disponível em: https://www.researchandmarkets.com/reports/4753475/essential-oils-market-size-share-and-trends. Acesso em: 11 mar. 2026.

ROESLER, R.; MALTA, L. G.; CARRASCO, L. C.; HOLANDA, R. B.; SOUSA, C. A. Antioxidant activity of *Caryocar brasiliense* (pequi) and characterization of components by electrospray ionization mass spectrometry. **Food Chemistry**, v. 110, n. 3, p. 711-717, 2008.

SANTOS, R. L.; VIEIRA, R. F.; AGOSTINI-COSTA, T. S. Aspectos botânicos, ecológicos e econômicos do pequizeiro. **Revista Brasileira de Fruticultura**, v. 35, n. 4, p. 1019-1033, 2013.

SCHÜTZE, M. K.; TAY, W. T.; AHMED, M. Z.; CAMERON, S. L.; KARUT, K.; DE BARRO, P. J. An update on the cryptic species of *Bemisia tabaci* and their global distribution. **Insects**, v. 13, n. 1, p. 1-24, 2022.

SIMÕES, C. M. O.; SPITZER, V. Óleos voláteis. In: SIMÕES, C. M. O.; SCHENKEL, E. P.; GOSMANN, G.; MELLO, J. C. P.; MENTZ, L. A.; LORETZI, P. R. (Org.). **Farmacognosia**: da planta ao medicamento. 6. ed. Porto Alegre: Editora da UFRGS, 2007. p. 467-495.

SODERLUND, D. M. Molecular mechanisms of pyrethroid insecticide neurotoxicity: recent advances. **Archives of Toxicology**, v. 86, n. 2, p. 165-181, 2012.

SOUZA, M. C.; GIUSTOLIN, T. A.; ALVARENGA, C. D.; COSTA, J. N. J.; ASPIAZÚ, I. Aqueous extract of pequi fruit to control *Spodoptera frugiperda* in corn. **Arquivos do Instituto Biológico**, v. 85, p. 1-5, 2018.

STANSLY, P. A.; NARANJO, S. E. **Bemisia: bionomics and management of a global pest**. Dordrecht: Springer, 2010.

TAY, W. T.; MAHARAJ, R.; GORDON, K.; JERMIIN, L. S.; BABENDREIER, D.; HALES, D. F. Cryptic species diversity in *Bemisia tabaci*. **Scientific Reports**, v. 7, n. 1, p. 1-13, 2017.

UPADHYAY, R.; SINGH, M.; SRIVASTAVA, S.; VERMA, P.; CHAUHAN, A.; GUPTA, R. Role of secondary metabolites in plant defense mechanisms: a molecular and biotechnological insights. **Phytochemistry Reviews**, v. 24, n. 1, p. 953-983, 2025.

VILLAS BOAS, G. L.; BRANCO, M. C. **Biologia e manejo da mosca-branca**. Brasília: Embrapa, 2009.

WEI, F.; LI, Q.; ZHANG, R.; CHEN, X.; WANG, Y. Imidacloprid affects human cells through mitochondrial dysfunction and oxidative stress. **Science of the Total Environment**, v. 951, p. 175422, 2024.

WILLIS, K. J. Vectors and virus transmission by *Bemisia tabaci*. **Virology Journal**, v. 14, p. 1-9, 2017.

YANG, N. W.; LI, A. L.; WAN, F. H.; LIU, W. X. Effects of plant essential oils on immature and adult sweetpotato whitefly, *Bemisia tabaci* biotype B. **Crop Protection**, v. 29, n. 10, p. 1200-1207, 2010.

4 CAPÍTULO 2

PROPRIEDADES INSETICIDAS DE ÓLEOS ESSENCIAIS E NANOEMULSÕES DO FRUTO DE *Caryocar brasiliense* CAMB. CONTRA *Bemisia tabaci* MEAM1 EM PLANTAS DE SOJA E SEUS EFEITOS INIBITÓRIOS SOBRE A ACETIL-COENZIMA A CARBOXILASE.

RESUMO

Nanoemulsões à base de óleos essenciais extraídos de plantas nativas são destacadas como alternativas sustentáveis ao uso intensivo de inseticidas sintéticos. Neste estudo, desenvolvemos nanoemulsões contendo óleo essencial da polpa do fruto do pequi (*Caryocar brasiliense* Camb.) e avaliamos seus efeitos inseticidas sobre *Bemisia tabaci* Middle East Asia Minor 1 (MEAM1) em folhas de soja. O óleo essencial era composto predominantemente por ésteres, com hexanoato de etila (92,82 ± 0,56%) como o composto majoritário. A nanoemulsão apresentou eficácia estatisticamente similar à do inseticida sintético 24 horas após o tratamento das folhas de soja nas doses de 10.000 e 20.000 ppm, sem causar fitotoxicidade, enquanto o óleo essencial in natura causou danos foliares na maior concentração. Após 48, 72, 96 e 120 horas de exposição, a concentração letal necessária para reduzir o número de indivíduos em 50% (CL50) para a nanoemulsão foi de 12368,0, 7162,8, 5364,9 e 3251,6 ppm, respectivamente, e para o óleo essencial in natura foi de 12617,5, 1102,3, 711,2 e 253,5 ppm, indicando um efeito inseticida mais forte do óleo essencial não formulado. No entanto, a nanoemulsão apresentou um perfil fitossanitário superior e não induziu sintomas de fitotoxicidade em folhas de soja. Análises de acoplamento molecular revelaram a interação do hexanoato de etila com a enzima acetil-CoA carboxilase, sugerindo que a interferência na biossíntese de lipídios seja um possível mecanismo de ação. Esses resultados demonstram o potencial inseticida dos óleos essenciais da polpa do fruto do pequi, destacando a nanoemulsificação como uma estratégia promissora para melhorar a eficácia biológica de forma economicamente viável.

Palavras-chaves: *Docking molecular*, Inseticidas botânicos, Mosca branca, Nanotecnologia, Produtos naturais.

4.1 INTRODUÇÃO

O manejo de pragas é um desafio constante na agricultura, causando redução na produtividade das culturas e perdas econômicas significativas (Oberemok *et al*., 2015; Zhao *et al*., 2022). As pragas de insetos danificam as culturas diretamente, alimentando-se dos tecidos vegetais, e indiretamente, transmitindo vírus e outros patógenos, o que leva a uma maior dependência do uso de inseticidas sintéticos (Oberemok *et al*., 2017; Wu *et al*., 2020; Araújo; Castanheira; Sousa, 2023). No entanto, o uso indiscriminado de pesticidas tem resultado em impactos negativos significativos, incluindo o acúmulo de resíduos tóxicos no meio ambiente (solo, ar e água), o desenvolvimento de resistência em pragas e efeitos nocivos à saúde humana (Ansari; Arif; Ahmad, 2013; Rezende-Teixeira *et al*., 2022). Essas consequências têm estimulado o desenvolvimento de alternativas sustentáveis, ecologicamente corretas e com ação específica (Isman, 2014).

Bemisia tabaci Middle East-Asia Minor 1 (MEAM1) (Hemiptera: Aleyrodidae), comumente conhecida como mosca-branca do biótipo B, é uma praga agrícola de importância global. É um inseto polífago e sugador de seiva que causa perdas econômicas significativas em diversas culturas, incluindo soja, tomate, feijão e algodão. Sua capacidade de causar danos é multifacetada e envolve alimentação direta, transmissão de vírus e produção de melada (Oliveira; Henneberry; Anderson, 2001; Horowitz *et al*., 2020). A aplicação contínua, muitas vezes excessiva, de inseticidas sintéticos, particularmente neonicotinoides, organofosforados e piretróides, resultou em intensa pressão seletiva, levando ao rápido desenvolvimento de populações resistentes de *B. tabaci* MEAM1 (Horowitz *et al*., 2020).

Os óleos essenciais de origem vegetal servem como alternativas eficazes, biodegradáveis e ecológicas para serem incorporadas no manejo integrado de pragas (MIP), com baixa toxicidade para organismos não-alvo e humanos (Miresmailli; Isman, 2014). Esses compostos botânicos são metabólitos secundários voláteis e lipofílicos produzidos por plantas aromáticas, principalmente em estruturas especializadas como tricomas glandulares, que atuam em seu mecanismo de defesa química contra insetos herbívoros, patógenos e estresse ambiental (Miresmailli; Isman, 2014; Campos *et al*., 2019). Eles são caracterizados por sua capacidade de agir como repelentes, antialimentares, inibidores de crescimento e inseticidas diretos por meio de múltiplos mecanismos fisiológicos, como a inibição de enzimas do sistema nervoso (por exemplo, acetilcolinesterase) e a alteração neurológica (por exemplo, bloqueio de canais de cálcio e antagonismo do receptor de octopamina) (Campos *et al*., 2019). Por serem constituídos por misturas complexas e naturais de metabólitos secundários (por exemplo, terpenoides,

alcaloides, flavonoides) em vez de ingredientes ativos isolados, as pragas têm dificuldade em desenvolver resistência.

Apesar de sua elevada eficácia, a aplicação em campo dos óleos essenciais enfrenta limitações importantes, sobretudo devido à sua elevada volatilidade, baixa solubilidade em água e rápida degradação quando expostos à luz, calor e oxigênio, o que compromete sua estabilidade e eficácia ao longo do tempo (Isman, 2006). O uso de sistemas nanoestruturados representam uma estratégia promissora para superar estas desvantagens e melhorar a eficácia da aplicação dos óleos essenciais no controle de insetos-praga (Sarmah *et al*., 2025). As nanoemulsões, dispersões coloidais cineticamente estáveis com gotículas com diâmetros médios inferiores a 200 nm (Mustafa; Hussein, 2020), possibilitam o aumento da estabilidade físico-química, solubilidade em água, penetração dos compostos ativos, favorecendo a liberação controlada e a maior adesão às superfícies foliares (Ghain *et al*., 2018; Gupta, 2020; Annadurai *et al*., 2024).

Caryocar brasiliense Camb., popularmente conhecida como pequi, é uma espécie arbórea nativa do Cerrado brasileiro e desempenha um papel crucial na economia, cultura e ecossistema da região (Lima *et al*., 2007; Santos *et al*., 2013). É uma árvore melífera típica do bioma, cuja frutificação ocorre principalmente entre janeiro e março, mas pode se estender a outros períodos (Lima *et al*., 2007). O óleo fixo da polpa de C. brasiliense possui alto teor de ácidos graxos, carotenoides e compostos bioativos, e tem despertado grande interesse nas indústrias alimentícia, farmacêutica e cosmética devido à sua rica composição química e propriedades funcionais. O óleo essencial das folhas de C. brasiliense (Azevedo *et al*., 2023), extratos hidroalcoólicos (Morais *et al*., 2020) e aquosos (Lima *et al*., 2022) das folhas, extratos aquosos das cascas dos frutos (Souza *et al*., 2018) e óleos fixados na polpa (Coutinho *et al*., 2006; Pereira *et al*., 2008) demonstraram atividade inseticida contra pragas de insetos.

No entanto, estudos que exploram o potencial inseticida de óleos essenciais extraídos da polpa do fruto de *C. brasiliense* ainda são limitados. Até o momento, não há registros de seu uso em formulações destinadas ao manejo de pragas agrícolas. Portanto, neste estudo, avaliamos a eficácia do óleo essencial da polpa do fruto de *C. brasiliense* e de nanoemulsão no controle de adultos de *B. tabaci* MEAM1, visando contribuir para alternativas inovadoras e sustentáveis para o manejo integrado de pragas, com impactos reduzidos no meio ambiente e na saúde humana. Adicionalmente, investigamos seu possível mecanismo de ação por meio de *docking molecular*.

4.2 MATERIAIS E MÉTODOS

4.2.1 Material botânico

Os frutos de *C. brasiliense* foram coletados no solo, sob árvores adultas, em janeiro de 2024, na zona rural do município de Monte Alegre, PI, Brasil, com coordenadas geográficas 9° 45' 20"S, 45° 18' 23"W e cadastrada no Sistema Nacional de Gestão do Patrimônio Genético e Conhecimentos Tradicionais Associados (SisGen) pelo nº A8E6E80, conforme preconiza a Lei Brasileira da Biodiversidade (nº 13.123/15).

4.2.2 Extração e análise química dos óleos essenciais da polpa de pequi

Após retirada das cascas dos frutos, a polpa do pequi (150 g) foi removida, triturada em liquidificador e submetida à extração do óleo essencial por hidrodestilação, em aparelho do tipo Clevenger, por 4 h. O óleo essencial extraído ao longo do processo de hidrodestilação foi coletado utilizando-se pipeta de Pasteur e o rendimento foi calculado. As extrações foram realizadas em quintuplicata.

Em seguida, as amostras dos óleos essenciais foram analisadas em cromatógrafo gasoso acoplado à espectrômetro de massas (GCMS-QP2010 SE - Shimadzu, AOC-5000), operando por impacto de elétrons a 70 eV. O cromatógrafo foi equipado com uma coluna capilar de sílica fundida (DB5, 30 m × 0,25 mm × 0,25 μm, Agilent) usando hélio de alta pureza como gás de arraste com vazão de 1 mL min^{-1}. As amostras foram diluídas em diclorometano (1 μg mL^{-1}) e 1 μL foi injetado em modo split 10:1. Os espectros de massa foram registrados na faixa de *m/z* 50-400 a 3,54 varreduras s^{-1}. A programação de temperatura foi a seguinte: temperatura inicial da coluna de 50°C por 1 min, com incrementos de temperatura de 4 °C min^{-1}, permanecendo a 290°C por 20 min, com injetor e interface a 260 °C. Os compostos foram identificados comparando seus espectros de massa com a biblioteca Nist. Para obtenção do índice retenção (IR), a amostra foi injetada com a mistura de padrão de n-alcanos (C7-C40) e o IR calculado de acordo com a equação de Van Den Dool e Kratz (1963).

4.2.3 Preparação e caracterização das nanoemulsões

O protocolo de baixa energia de nanoemulsão invertida foi utilizado para o preparo das nanoemulsões, de acordo com Ostertag, Weiss e McClements (2012), com modificações. Os

experimentos foram planejados para obter uma composição final com massa total de 50 g, incluindo água deionizada (m/m), tween 20 (500 ppm) e óleo essencial em diferentes concentrações (0, 1250, 2500, 5000, 10000 e 20000 ppm). A fase orgânica foi preparada a partir da mistura do óleo essencial e o surfactante, os quais foram mantidos sob agitação constante a 750 rpm por 30 min. Posteriormente, a fase aquosa foi adicionada à fase orgânica utilizando uma bureta com vazão de 2 mL min^{-1}, sob agitação constante de 750 rpm por 60 min. As formulações foram preparadas em duplicata para cada dose, mantidas a temperatura ambiente (30±2°C) e caracterizadas quanto ao tamanho de partículas por espalhamento dinâmico de luz (DLS) (nanoPartica SZ-100V2, Horiba Scientific) após 1 e 30 dias de preparo (Rodrigues *et al*., 2025).

4.2.4 Criação de *Bemisia tabaci* e bioensaio de toxicidade

Os bioensaios de toxicidade foram realizados utilizando adultos de mosca-branca. Os insetos foram coletados em Eugenópolis, PI, Brasil (9°12'58”S 44°26'37”W) e a criação destes foi mantida em plantas de couve (*Brassica oleracea* L.). Para montagem dos bioensaios, plantas de soja (variedade Extrema 6002) foram cultivadas em casa de vegetação em vasos de 5 L, em solo coletado na Fazenda Marafon (9° 13' 28,9" S, 44° 44' 44,4" W), Bom Jesus, PI, Brasil, em área de Cerrado cultivado, previamente analisado quanto às propriedades físicas e químicas, e, posteriormente, corrigido e adubado (Malavolta; Vitti; Oliveira, 1989).

O terceiro trifólio de plantas de soja foi retirado com auxílio de um bisturi, deixando um pecíolo de 5 cm, e imergidos nos seguintes tratamentos: (1) óleo essencial da polpa dos frutos de pequi *in natura* em diferentes concentrações (0, 1000, 2500, 5000, 10000, and 20000 ppm); (2) nanoemulsão do óleo essencial em diferentes concentrações (0, 1000, 2500, 5000, 10000, and 20000 ppm); (3) the synthetic insecticide thiamethoxam prepared according to the product label (250000 ppm m/m) (controle positivo). A aplicação do óleo essencial *in natura* foi realizada a partir da suspensão em solução de tween 20 a 0,05%.

As folhas de soja tratadas foram colocadas em placas de Petri contendo papel de filtro umedecido com água destilada. Os pecíolos foram envolvidos em algodão, o qual foi umedecido com 1 mL de água destilada. Em seguida, adultos de *B. tabaci* (20 indivíduos) foram transferidos para as placas de Petri contendo folhas de soja tratadas e incubados em câmara B.O.D. (biochemical oxygen demand) a 27°C, com fotofase de 12 h (Rodrigues *et al*., 2025). O delineamento foi inteiramente casualizado com quatro repetições para cada uma das concentrações.

A porcentagem de mortalidade dos insetos foi registrada diariamente por cinco dias pós-tratamento (Abbott, 1925). Devido à falta de ajuste dos resíduos à distribuição normal, verificada pelo teste de Shapiro-Wilk, os dados foram submetidos ao teste não-paramétrico de Mann-Whitney. As análises de regressão foram realizadas no SigmaPlot v14.0 (Systat Software Inc. Chicago, EUA), as quais foram utilizadas para calcular a concentração letal (CL50) e seus intervalos de confiança de 95% (IC 95%).

4.2.5 Preparação das estruturas e *docking molecular*

A sequência proteica da acetil-CoA carboxilase de *B. tabaci* foi obtida do banco de dados de sequências proteicas UniProt sob o código de acesso A0A6B9I924 (Bateman *et al*., 2025). A estrutura tridimensional da proteína foi modelada no servidor AlphaFold (Abramson *et al*., 2024) utilizando a sequência obtida no UniProt como entrada. A estrutura 3D do hexanoato de etila foi obtida do banco de dados de química PubChem, com o código de acesso 31265 (Kim *et al*., 2017). O PlayMolecule ProteinPrepare foi utilizado para preparar e ajustar a protonação da estrutura proteica em pH 7,4 (Martínez-Rosell; Lopéz-Blanco; De Fabritiis, 2017). Os cálculos de protonação para o hexanoato de etila em pH 7,4 foram realizados utilizando o software MarvinSketch versão 18.24. Posteriormente, os hidrogênios e as cargas foram ajustados utilizando o software Discovery Studio versão 19.1, e as estruturas foram minimizadas com o mesmo software. O software AutoDock4 foi utilizado para preparar os arquivos para o acoplamento molecular. Este processo envolveu o cálculo e a adição de cargas de Gasteiger, bem como a remoção de átomos de hidrogênio não polares de todas as estruturas (Morris *et al*., 2009). O acoplamento molecular foi realizado usando o AutoDock Vina 1.1.2, desenvolvido pelo Scripps Research Institute (Eberhardt *et al*., 2021).

4.3 Resultados e Discussão

4.3.1 Composição química do óleo essencial da polpa dos frutos de *C. brasiliense*

O rendimento da extração do óleo essencial da polpa dos frutos de *C. brasiliense* foi de $0{,}29 \pm 0{,}09\%$. Um total de 12 compostos foram identificados por meio de análises de GC-MS, predominantemente ésteres e um monoterpeno, com o hexanoato de etila (92,82±0,56%) como constituinte majoritário, seguido de β-ocimeno (3,36±0,11%) (Tabela 2). O hexanoato de etila também foi encontrado como componente majoritário do óleo essencial da polpa dos frutos de

C. brasiliense coletadas em diferentes áreas de Cerrado no estado do Mato Grosso, Brasil, com abundância relativa de 55,92%, seguido de (*E*)-β-ocimeno (17,65%) e octanoato de etila (4,79%) (Cordeiro *et al*., 2013). Amostras provenientes de Chapada dos Guimarães, MT, Brasil, também evidenciaram a predominância de hexanoato de etila (52,9%), seguido por octanoato de etila (4,6%), álcool tetraidrofurfurílico (4,3%), butanoato de etila (4,1%), palmitato de butila (3,7%), estearato de isobutila (2,6%), ácido 3-metilvalérico (2,6%) e fenilacetaldeído (0,4%).

Tabela 2 - Composição química do óleo essencial dos frutos de *Caryocar brasiliense.*

Nº	Compostos	RI (calc.)	RI (lit.)	Abundância Relativa (%)[a]
1	2-Metilbutanoato de etila	859	846	0,37±0,03
2	3-Metilbutanoato de etila	862	856	0,06±0,02
3	Hexanoato de metila	922	910	0,46±0,10
4	Hexanoato de etila	999	998	92,82±0,56
5	Butirato de 2-metilbutila	1026	-	0,41±0,18
6	Hex-2-enoato de etila	1149	-	0,77±0,04
7	β-Ocimeno	1046	1050	3,36±0,11
8	2-Metilpropanoato de isopentila	1056	-	0,59±0,03
9	Butirato de 2-metilbutila	1058	1056	0,12±0,02
10	Octanoato de etila	1197	1195	0,47±0,24
11	Hexanoato de isopentila	1252	1254	0,20 ±0,9
12	Hexanoato de pentila	1254	1282	0,11±0,06
13	Compostos desconhecidos			0,26

[a]Média (abundância relativa em porcentagem) ± desvio padrão. RI (calc.): índice de retenção calculado; RI (lit.): índice de retenção da literatura.

O óleo essencial da polpa dos frutos de *C. brasiliense* originária de Cordisburgo, MG, Brasil, apresentou rendimento de aproximadamente 0,0020%, com hexanoato de etila (63,0%) e octanoato de etila (16,3%) como principais componentes (Damiani *et al*., 2009). Óleos essenciais provenientes dos estados do Maranhão (MA), Minas Gerais (MG) e Tocantins (TO), Brasil, apresentaram rendimento variando de 0,13 a 1,15%, com hexanoato de etila (73 a 91%) como composto majoritário nas amostras dos estados de MA e MG, enquanto (*E*)-beta-ocimene (26 a 21%) e isopropyl isopentanoate (22 a 12%) foram em maior abundância nas amostras de TO (Geőcze *et al*., 2013). Hexanoato de etila e octanoato de etila foram previamente descritos como os constituintes de impacto no aroma do pequi (Damiani, 2009; Geõcze *et al*., 2013).

O rendimento dos óleos essenciais e o perfil dos metabólitos são afetados por fatores sazonais e pelo estágio de desenvolvimento da planta, incluindo período do ano, fase fenológica, horário de coleta e condições pós-colheita (Valkovszkin *et al*., 2023). Processos

como maturação do fruto, variação de umidade e intensidade luminosa ao longo das estações podem modificar a concentração dos metabólitos secundários. Além disso, práticas relacionadas ao processamento, como tipo de secagem, tempo entre colheita e destilação e método de extração, podem influenciar de forma expressiva tanto o rendimento quanto a composição final dos óleos essenciais (Valkovszkin *et al*., 2023).

Quanto à composição química dos óleos essenciais, esta pode variar significativamente em função de fatores geográficos e edafoclimáticos, como altitude, tipo de solo, disponibilidade hídrica, temperatura e radiação solar. Esses elementos interferem diretamente nas vias biossintéticas dos metabólitos secundários, alterando a proporção e até a presença de compostos voláteis específicos. Além disso, diferenças genéticas entre populações da mesma espécie, contribuem para padrões químicos distintos, mesmo quando cultivadas sob condições ambientais semelhantes (Coutinho *et al*., 2020).

4.3.2 Nanoemulsão de óleo essencial da polpa dos frutos de *C. brasiliense*

As nanoemulsões preparadas com o óleo essencial de frutos de pequi apresentaram tamanhos médios de partículas variando de aproximadamente 4 a 185 nm ao longo do período de 1 a 30 dias após a preparação (Tabela 3). O aumento da concentração do óleo essencial resultou em um aumento no tamanho das partículas da nanoemulsão, o que foi atribuído à quantidade de princípio ativo encapsulado na matriz coloidal. Não existem estudos envolvendo o desenvolvimento de formulações de nanoemulsão utilizando óleo essencial da polpa de *C. brasiliense*. Relatórios anteriores focaram predominantemente no uso do óleo fixo da polpa e exploraram suas propriedades terapêuticas em contextos biomédicos (Coutinho *et al*., 2020; Pinheiro *et al*., 2022; Ombredane *et al*., 2022). Essa lacuna destaca a necessidade de estudos voltados para a exploração agronômica desses sistemas.

Tabela 3 - Análise por DLS da nanoemulsão carregada com óleo essencial de frutos de C*aryocar brasiliense* em diferentes doses após 1 e 30 dias de preparação

Concentração (ppm)	Tamanho da gota (nm) 1 dia	Tamanho da gota (nm) 30 dias
0	4,00±2,77	134,16±0,00
1250	9,15±0,00	108,83±96,93
2500	17,98±8,92	185,05±26,54
5000	96,11±28,21	179,93±39,40
10000	139,95±23,23	179,93±39,40
20000	140,29±13,57	179,93±39,40

As nanoemulsões contendo óleos essenciais têm se destacado como uma estratégia eficiente para superar limitações intrínsecas desses produtos botânicos, especialmente aquelas relacionadas à instabilidade, volatilização e dificuldade de aplicação (Lucia; Guzmán, 2021). Esse sistema nanoestruturado proporciona uma entrega mais adequada para substâncias hidrofóbicas, permitindo sua dispersão uniforme e favorecendo uma liberação mais controlada (Yammine *et al*., 2024). Além disso, o reduzido tamanho das gotículas aumenta a área de superfície disponível gerando maior molhabilidade, espalhabilidade e capacidade de penetração, em decorrência da redução da tensão interfacial (Yammine *et al*., 2024), o que potencializa a interação com o inseto-praga e contribui para maior eficácia no controle.

Dessa forma, a obtenção dessas nanoestruturas pode ser realizada por meio de dois métodos principais, classificados como métodos de baixa energia e métodos de alta energia. Os métodos de baixa energia, utilizado neste estudo, baseiam-se no aproveitamento da energia química interna do sistema, promovendo a emulsificação a partir de alterações controladas na composição ou nas condições físico-químicas do meio. Em contraste, os métodos de alta energia utilizam dispositivos mecânicos capazes de gerar forças disruptivas intensas, tais como agitadores de alto cisalhamento, homogeneizadores de alta pressão e geradores de ultrassom, responsáveis pela redução do tamanho das gotículas até a escala nanométrica (Solans; Solé, 2012).

4.3.3 Toxicidade do óleo essencial da polpa dos frutos do *C. brasiliense* in natura e em nanoemulsão contra adultos de *B. tabaci*

Os óleos essenciais e nanoemulsões da polpa de *pequi* apresentaram atividade inseticida contra adultos de *B. tabaci* MEAM1 24 h após o tratamento das folhas de soja, com diferença estatisticamente significativa entre as concentrações ($p<0,0001$). As curvas dose-resposta de ambos os tratamentos foram ajustadas a um modelo sigmoidal (Figura 4A). A nanoemulsão apresentou eficácia estatisticamente similar à do inseticida sintético tiametoxam nas concentrações de 10000 e 20000 ppm (Figura 5), sem causar fitotoxicidade nas folhas de soja. Em contraste, o óleo essencial *in natura* apresentou eficácia estatisticamente similar à do inseticida comercial apenas na concentração de 20.000 ppm; entretanto, sintomas de fitotoxicidade nas folhas foram observados nessa concentração (Figura 6).

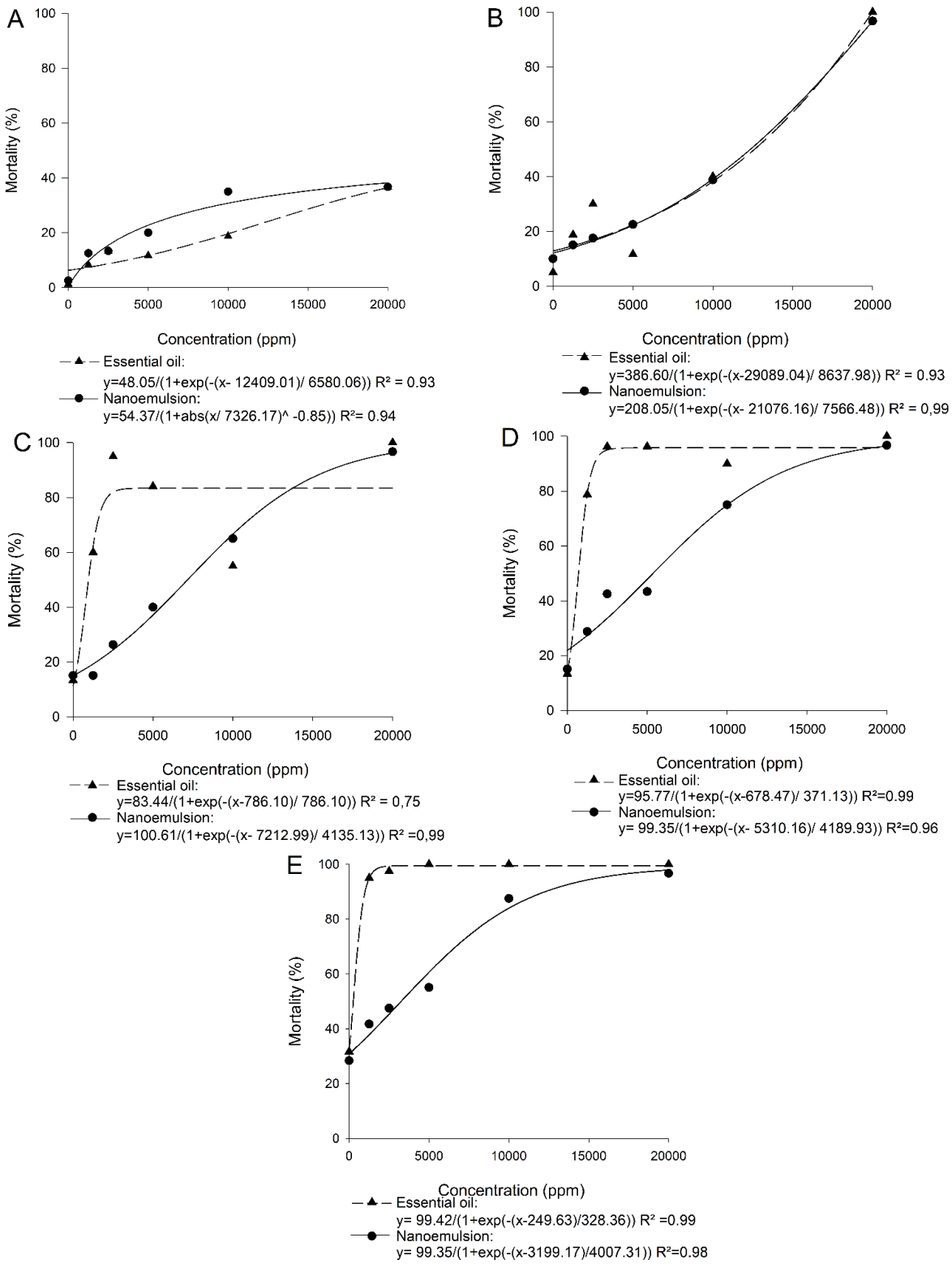


Figura 4 - Mortalidade (%) de adultos de *Bemisia tabaci* (MEAM1) avaliada aos 24 (A), 48 (B), 72 (C), 96 (D) e 120 h (E) após o tratamento de folhas de soja com óleo essencial de pequi *in natura* e sua nanoemulsão em diferentes concentrações.

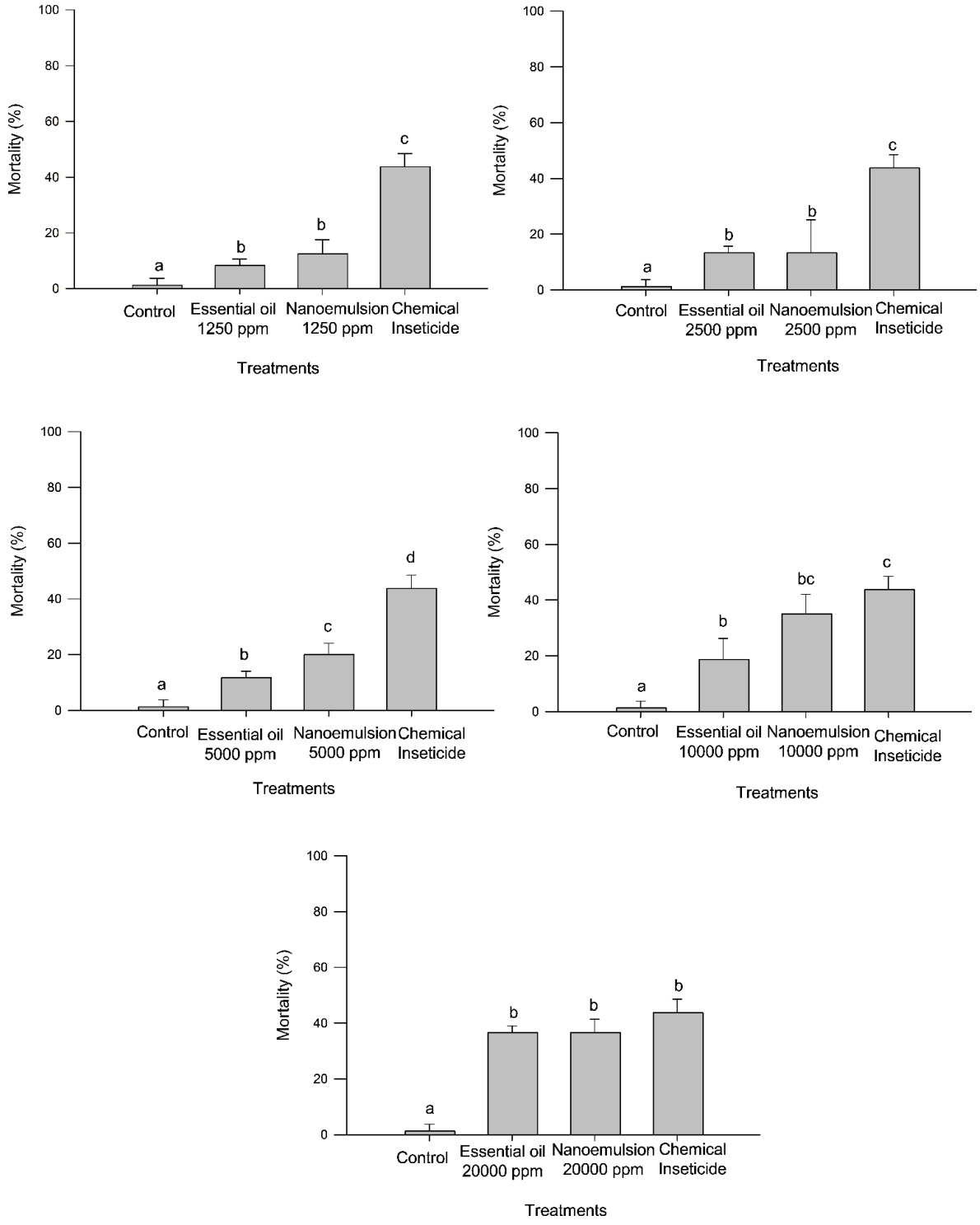


Figura 5 - Mortalidade (%) de adultos de *Bemisia tabaci* MEAM1 24 h após o tratamento das folhas de soja com o óleo essencial da polpa dos frutos de pequi *in natura* e em nanoemulsão. As barras nas figuras representam o desvio padrão das repetições. Tratamentos com a mesma letra são significativamente iguais de acordo com o teste de Mann-Whitney a nível de 0,05.



Figura 6 - Efeito fitotóxico em folhas de soja observado 24 h após o tratamento das folhas de soja com o óleo essencial da polpa dos frutos de pequi *in natura* e em nanoemulsão na concentração de 20.000 ppm. (A) Controle (B) Folhas tratadas com nanoemulsão contendo óleo essencial de pequi. (C) Folhas tratadas com óleo essencial *in natura*.

Com o aumento do tempo de exposição, o número de indivíduos mortos aumentou em todas as concentrações avaliadas (Figura 4). Após 48 h de exposição, a mortalidade atingiu 100% na concentração de 20.000 ppm para ambos os tratamentos (Figura 4B), com concentrações letais para reduzir o número de indivíduos em 50% (CL_{50}) de 12.368,0 e 12.617,5 ppm para a nanoemulsão e o óleo essencial *in natura*, respectivamente. As curvas dose-resposta foram ajustadas a um modelo sigmoidal, com diferenças significativas entre as concentrações ($p<0,0001$). A nanoemulsão e o óleo essencial *in natura* apresentaram eficácia estatisticamente semelhante nas concentrações de 1250, 2500, 10000 e 20000 ppm (Figura 7), demonstrando eficácia similar à do inseticida sintético apenas na concentração de 20000 ppm.

A resposta inseticida intensificou-se em 72 h, com valores de CL_{50} de 7162,8 e 1102,3 ppm para a nanoemulsão e o óleo essencial *in natura*, respectivamente, indicando aumento da toxicidade do óleo essencial durante esse período, que causou 80% de mortalidade dos indivíduos a 5000 ppm. Houve diferenças estatisticamente significativas entre as doses ($p<0,0001$) com ajuste sigmoidal das curvas dose-resposta (Figura 4C). O óleo essencial in natura apresentou eficácia estatisticamente semelhante à do inseticida comercial nas concentrações de 2500, 5000 e 20000 ppm. Por outro lado, a nanoemulsão atingiu eficácia semelhante à do inseticida químico, mas apenas na concentração de 20000 ppm (Figura 8).

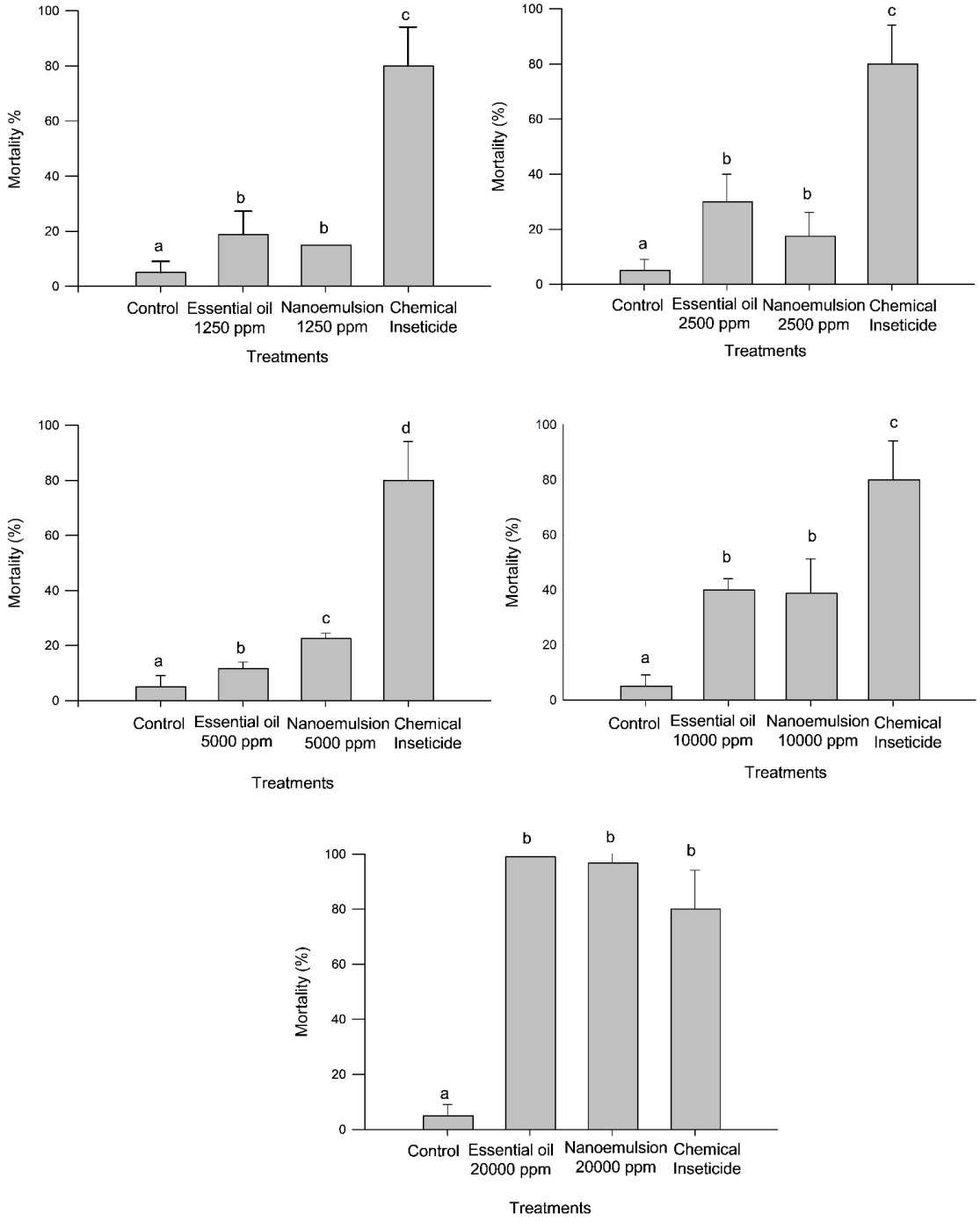


Figura 7 - Mortalidade (%) de adultos de *Bemisia tabaci* MEAM1 48 h após o tratamento das folhas de soja com óleo essencial da polpa dos frutos de pequi *in natura* e em nanoemulsão. As barras nas figuras representam o desvio padrão das repetições. Tratamentos com a mesma letra são significativamente iguais de acordo com o teste de Mann-Whitney a nível de 0,05.

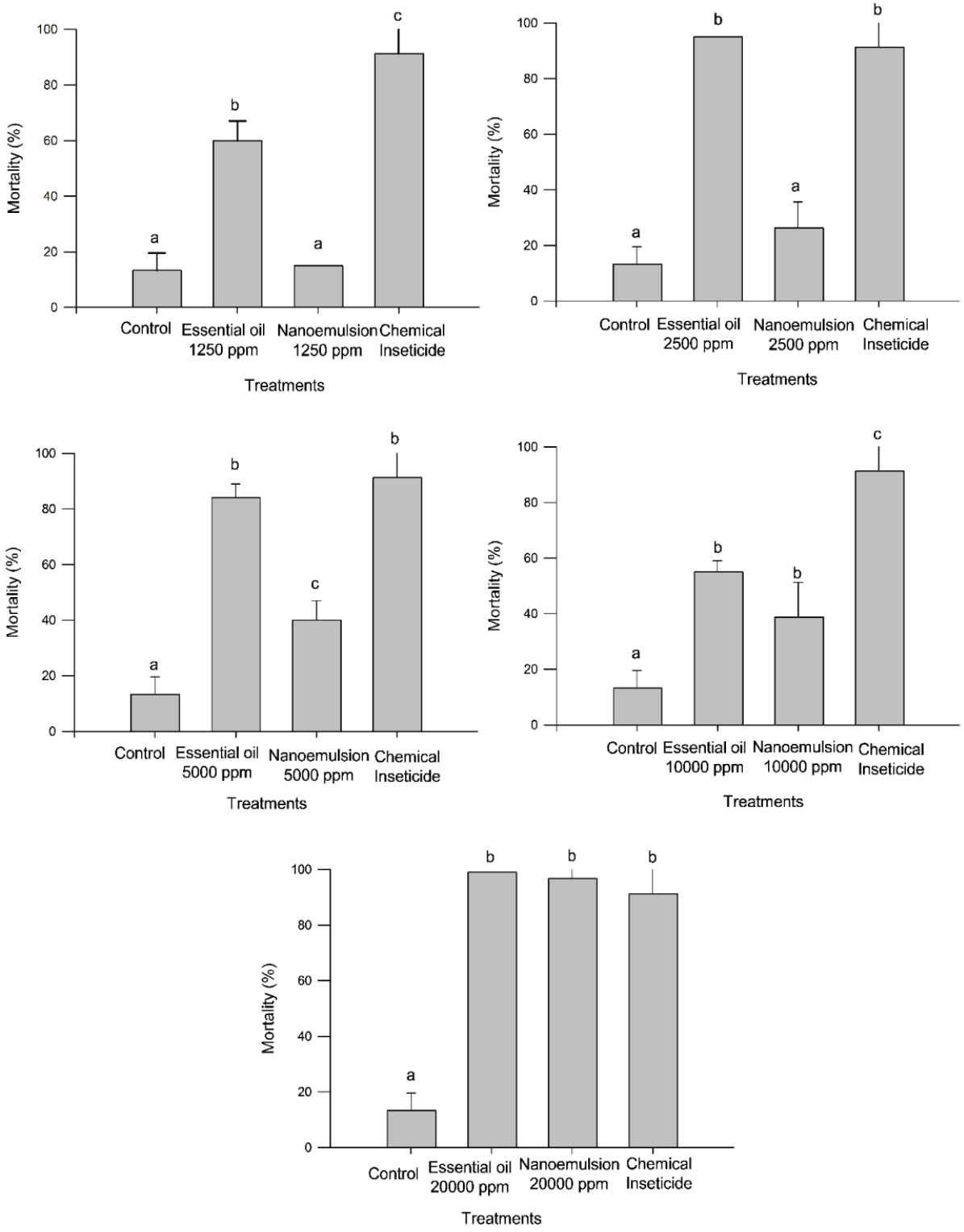


Figura 8 - Mortalidade (%) de adultos de *Bemisia tabaci* MEAM1 72 h após o tratamento das folhas de soja com óleo essencial da polpa dos frutos de pequi *in natura* e em nanoemulsão. As barras nas figuras representam o desvio padrão das repetições. Tratamentos com a mesma letra são significativamente iguais de acordo com o teste de Mann-Whitney a nível de 0,05.

Após 96 h de exposição, os valores de LC_{50} da nanoemulsão e dos óleos essenciais *in natura* foram de 5364,9 e 711,2 ppm, respectivamente, demonstrando que, embora ambos os tratamentos tenham resultado em alta mortalidade, houve diferenças na velocidade de resposta. As curvas dose-resposta permaneceram ajustadas ao modelo sigmoidal, com diferenças estatisticamente significativas entre as doses ($p<0,0001$) (Figura 4D). A eficácia do óleo essencial *in natura* não diferiu da do inseticida em nenhuma das concentrações avaliadas, enquanto a nanoemulsão apresentou desempenho estatisticamente semelhante ao controle químico apenas na concentração de 10000 ppm (Figura 9). Resultados semelhantes foram observados após 120 h de exposição (Figura 10), com valores de LC_{50} de 3251,6 e 253,46 ppm para a nanoemulsão e o óleo essencial *in natura*, respectivamente (Figura 4E).

Esses resultados demonstram o potencial inseticida do óleo essencial da polpa de pequi, tanto na forma natural quanto em nanoemulsões, sendo estas últimas particularmente promissoras quando associadas à redução dos efeitos fitotóxicos. A fitotoxicidade observada em plantas tratadas com o óleo essencial em altas concentrações é consistente com evidências de que os constituintes voláteis e lipofílicos dos óleos essenciais estão associados a efeitos fitotóxicos, incluindo alterações fisiológicas relacionadas a danos à integridade celular. A nanoemulsão exerce um efeito protetor ao promover o encapsulamento de compostos bioativos em gotículas nanométricas estabilizadas por surfactantes, formando uma barreira físico-química que limita a exposição direta do óleo a fatores ambientais como luz, oxigênio e variações de temperatura. Esse mecanismo reduz a volatilização e a degradação oxidativa, contribuindo para a manutenção da integridade química e da atividade biológica do óleo essencial (Rodrigues *et al*., 2025).

A maior atividade inseticida observada para o óleo essencial *in natura* após 72 h de exposição, em comparação com a nanoemulsão, pode ser atribuída à maior disponibilidade inicial de seus constituintes bioativos. Óleos essenciais não formulados apresentam alta volatilidade e rápida difusão de compostos lipofílicos, o que favorece uma absorção mais imediata pelos insetos e pode resultar em efeitos tóxicos mais intensos em avaliações de médio prazo (Isman, 2006; Lucia; Guzmán, 2021; Gupta *et al*., 2023). A nanoemulsão, por sua vez, funciona como um sistema de liberação controlada no qual os compostos ativos permanecem parcialmente encapsulados, reduzindo a volatilização e modulando a biodisponibilidade de metabólitos secundários. Consequentemente, a liberação gradual de compostos bioativos tende a resultar em uma resposta inseticida menos imediata, porém caracterizada por maior persistência ao longo do tempo, como amplamente relatado para nanoemulsões de óleos essenciais (Ayllón-Gutiérrez *et al*., 2024).

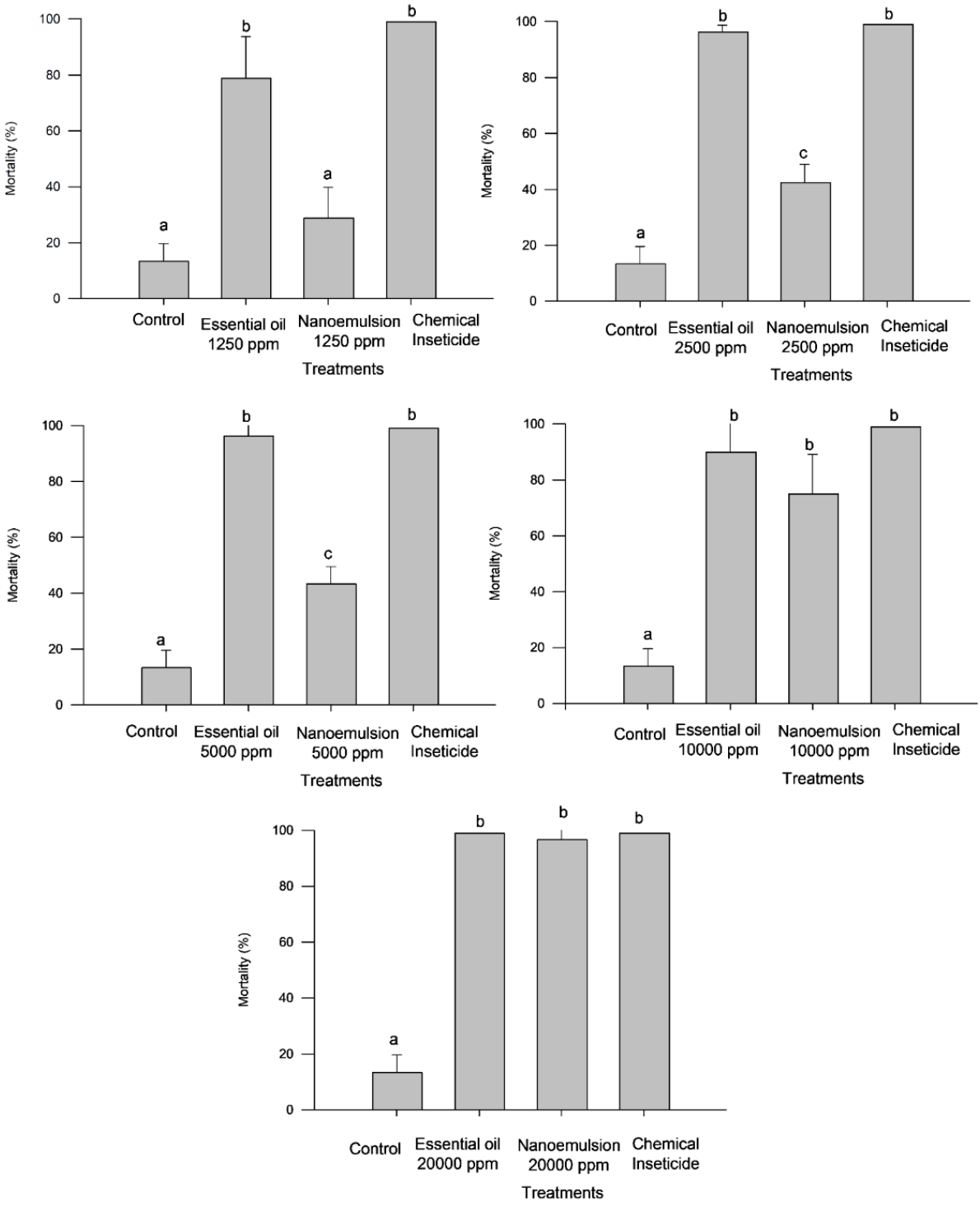


Figura 9 - Mortalidade (%) de adultos de *Bemisia tabaci* MEAM1 96 h após o tratamento das folhas de soja com óleo essencial da polpa dos frutos de pequi *in natura* e em nanoemulsão. As barras nas figuras representam o desvio padrão das repetições. Tratamentos com a mesma letra são significativamente iguais de acordo com o teste de Mann-Whitney a nível de 0,05.

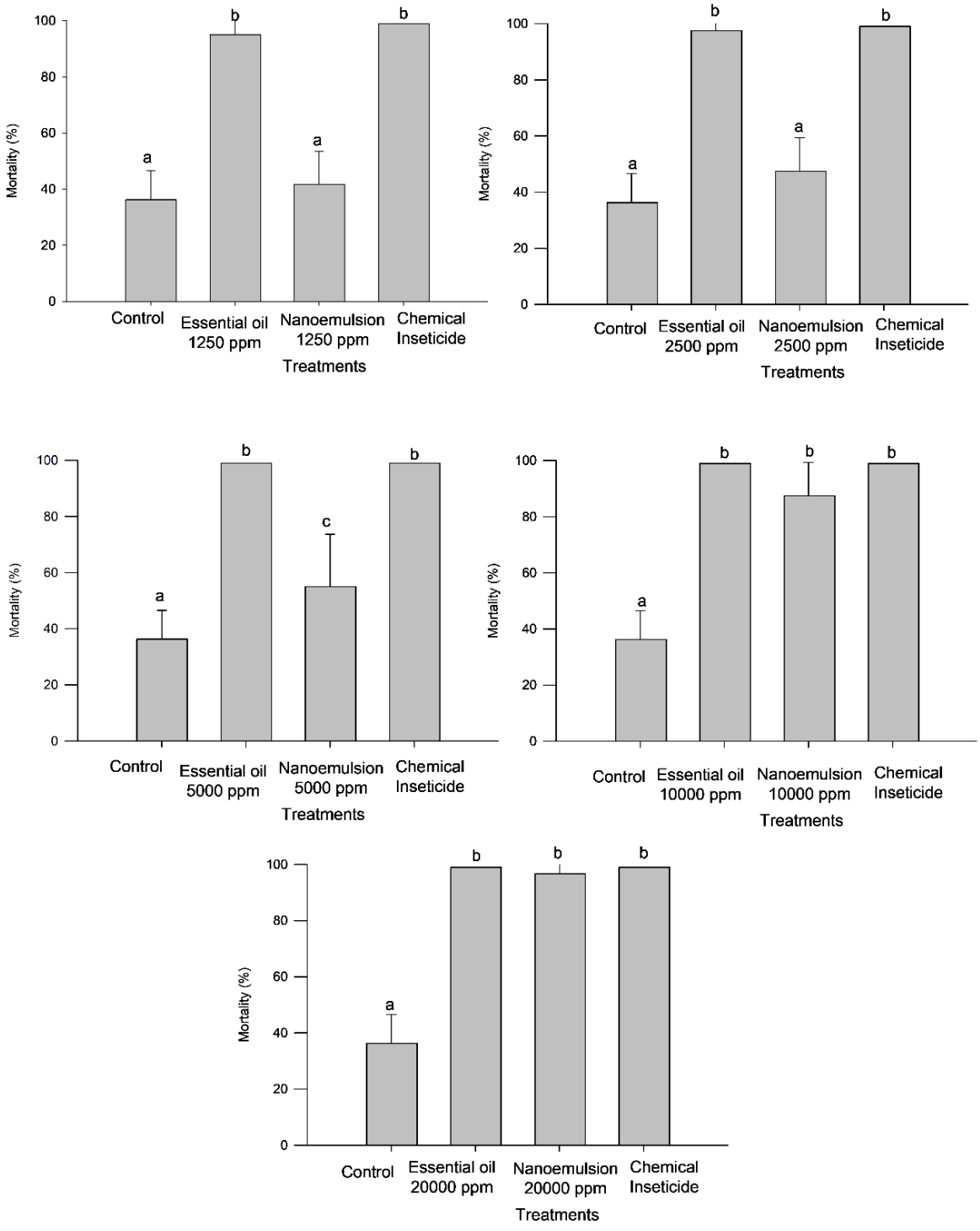


Figura 10 - Mortalidade (%) de adultos de *Bemisia tabaci* MEAM1 120 h após o tratamento das folhas de soja com óleo essencial da polpa dos frutos de pequi *in natura* e em nanoemulsão. As barras nas figuras representam o desvio padrão das repetições. Tratamentos com a mesma letra são significativamente iguais de acordo com o teste de Mann-Whitney a nível de 0,05.

De acordo com os princípios do manejo integrado de pragas, esse comportamento representa uma vantagem funcional da formulação nanoemulsionada (Abd-Elnabi; El-Sawy; Badawy, 2025). Embora os óleos essenciais in natura possam apresentar maior toxicidade aparente durante certos períodos, sua volatilização acelerada e maior interação direta com os tecidos vegetais está associada à fitotoxicidade e menor persistência biológica. Em contrapartida, a nanoemulsão proporciona maior estabilidade físico-química aos compostos ativos e reduz sua agressividade em relação à planta hospedeira, resultando em um perfil fitossanitário mais seguro, compatível com estratégias sustentáveis de controle de pragas (Lucia; Guzmán, 2021). Estudos têm demonstrado que nanoemulsões à base de óleos essenciais prolongam a atividade inseticida, reduzem a necessidade de reaplicação e aumentam a eficiência em condições de campo, o que é particularmente relevante para o controle de pragas sugadoras (Oliveira *et al*., 2019; Marques *et al*., 2023; Annadurai *et al*., 2024). Assim, a menor velocidade de resposta inicial da nanoemulsão é compensada por sua maior persistência, seletividade e potencial de aplicação em programas de manejo integrado de pragas.

Ademais, não há registros na literatura sobre a atividade inseticida dos óleos essenciais da polpa de C. brasiliense, seja na forma natural ou em nanoemulsões. Em contrapartida, extratos e óleos fixos dessa espécie têm demonstrado atividade inseticida relevante contra diferentes insetos-praga (Solans *et al*., 2005; Coitinho *et al*., 2006; Pereira *et al*., 2008; Avelino *et al*., 2019; Lima *et al*., 2022). O óleo essencial do mesocarpo (polpa) dos frutos de *C. brasiliense* exibiu atividade nematicida, causando até 82% de mortalidade em juvenis de Meloidogyne javanica, efeito primariamente associado à presença de ésteres e monoterpenos (Solans *et al*., 2005). O óleo fixo dos frutos de *C. brasiliense* reduziu a viabilidade dos ovos e a emergência de adultos de *Callosobruchus maculatus* (Pereira *et al*., 2008) e demonstrou toxicidade contra ninfas de *Aphis craccivora* em favas (Avelino *et al*., 2019) e adultos de *Sitophilus zeamais* em grãos de milho (Coitinho *et al*., 2006). Extratos aquosos das cascas dos frutos controlaram eficientemente *Spodoptera frugiperda* (Souza *et al*., 2018), enquanto extratos hidroalcoólicos das folhas inibiram a emergência de adultos de *Aedes aegypti* (Morais *et al*., 2020). O extrato aquoso (Lima *et al*., 2022) e o óleo essencial (Lima *et al*., 2022) extraídos das folhas demonstraram efeitos larvicidas contra *A. aegypti*.

Considerando a expressiva toxicidade observada nos bioensaios com o óleo essencial e a nanoemulsão da polpa dos frutos de *C. brasiliense*, torna-se relevante investigar quais constituintes químicos podem estar associados a esse efeito inseticida. A análise da composição do óleo revelou o hexanoato de etila como composto majoritário, sugerindo sua possível contribuição para a atividade biológica observada. Nesse contexto, a elucidação de potenciais

alvos moleculares desse composto em *Bemisia tabaci* pode fornecer evidências adicionais sobre seu mecanismo de ação, motivando a realização de estudos de docking molecular.

4.3.4 *Docking molecular* Acetil-Coenzima A Carboxilase (ACC) e hexanoato de etila

Estudos prévios sugerem que ésteres de acil-CoA de cadeia média e longa (Hillgartner; Charron, 1997; Zu *et al*., 2013; Pinkosky *et al*., 2020) podem atuar como inibidores da acetil-CoA carboxilase (ACC), uma enzima que desempenha um papel crucial na biossíntese de ácidos graxos, convertendo acetil-CoA em malonil-CoA, a primeira etapa na síntese de lipídios para uso em membranas celulares e armazenamento de energia (Brownsey; Denton, 1987). Assim, considerando a similaridade estrutural, estudos de acoplamento molecular foram conduzidos com hexanoato de etila, identificado neste estudo como o principal constituinte do óleo essencial da polpa de pequi, para investigar sua ação como inibidor da ACC em *B. tabaci* MEAM1.

Hexanoato de etila apresenta dois possíveis sítios de interação na ACC. O primeiro sítio localiza-se no domínio carboxil transferase (CT) e o segundo no domínio responsável pela carboxilação da biotina (BC) (Figura 11). Esse primeiro resultado foi obtido através do blind docking, no qual utiliza-se a proteína completa como possível região de encaixe do ligante, ou seja, o hexanoato de etila poderia interagir em qualquer região da ACC. O primeiro sítio e mais provável de interação do ligante na proteína localiza-se no domínio CT e foi indicado por sete das vinte poses resultantes do blind docking, sendo as poses 1, 2, 3, 7, 8, 10 e 20 (Tabela 4 e Figura 12). Os principais resíduos de aminoácidos da ACC, com uma distância de até 3 Å, com interação com o hexanoato de etila nesse primeiro sítio são GLN1772, HIS1776, GLN1779, PRO1828, GLU1829, LYS2056, SER2059, ILE2072 e ARG2136.

O segundo possível sítio de interação do ligante na ACC foi indicado por seis poses das vinte resultantes, entretanto, as poses nesse sítio foram ranqueadas nas posições 4, 11, 12, 15, 16 e 17 (Tabela 4 e Figura 13). Os principais resíduos de aminoácidos nesse segundo sítio são SER743, ILE744, ARG745, GLY746, ARG749, THR750, VAL752, GLU753, ARG896, VAL898, ASN901 e THR903. Esses resíduos de aminoácidos se localizam no domínio de carboxilação da biotina (BC). As demais poses resultantes do blind docking formaram clusters possuindo apenas duas poses (5 e 14, 6 e 18, 9 e 19) e a pose treze foi única isolada sem sobreposição com outras poses. Visto esse resultado, é mais provável que um dos dois primeiros sítios seja o local de interação entre hexanoato de etila e a proteína ACC.

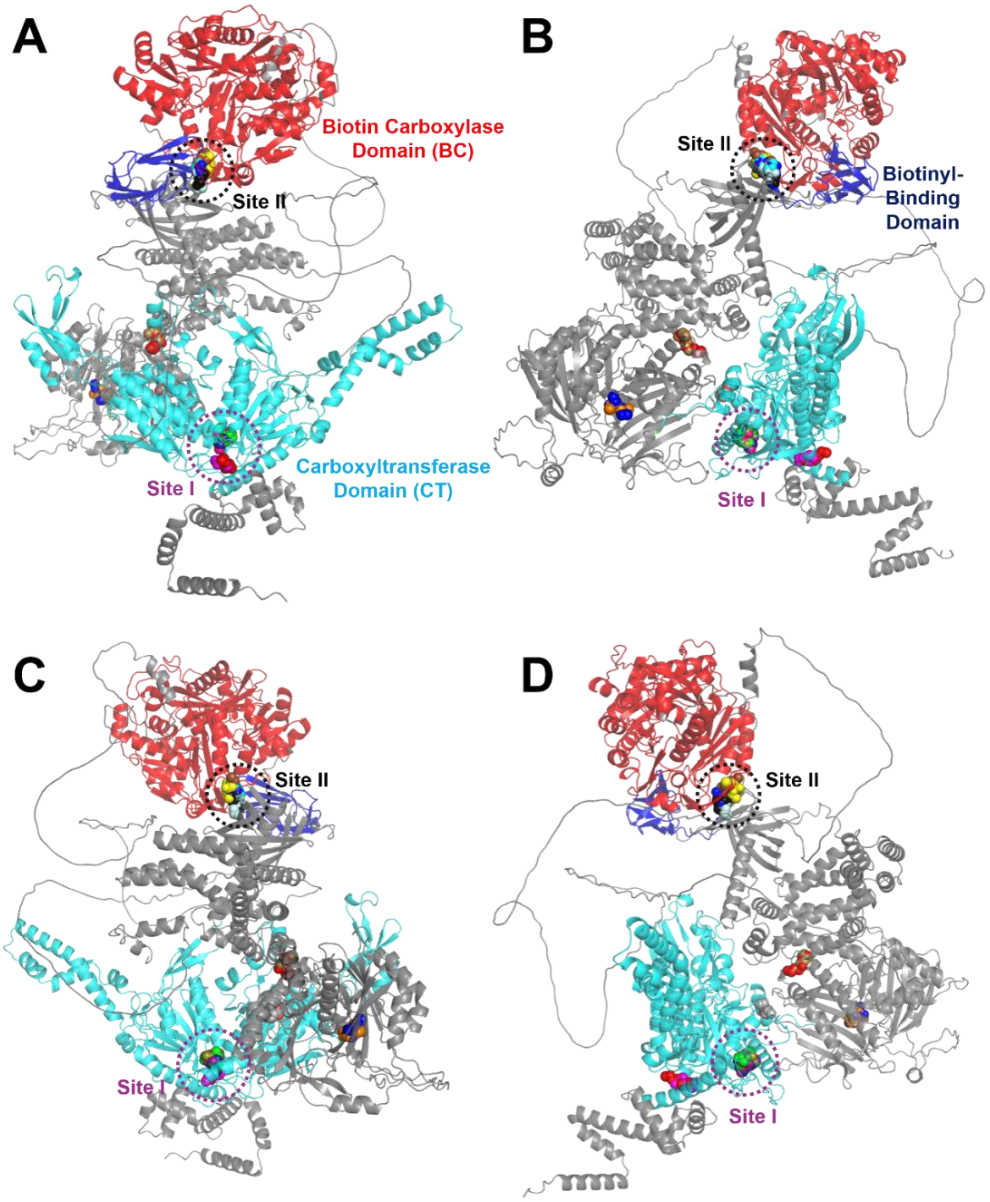


Figura 11 - *Blind docking* entre a enzima Acetil-CoA Carboxilase (ACC) e hexanoato de etila. B, C e D são rotações de 90° ao redor de um eixo central imaginário da proteína.

O *blind docking* é ideal para encontrar possíveis sítios de interação de ligantes em proteínas, todavia essa metodologia não obtém os melhores resultados de conformações nos sítios encontrados, logo são indicados para encontrar sítios, mas não conformações do ligante nesses sítios. Para obter as melhores conformações nos sítios indicados pelo blind docking, foram realizados dois dockings moleculares direcionados, ou seja, cada provável sítio de interação foi utilizado como única região de interação do ligante com a proteína.

Tabela 4 - Escores de docking molecular obtidos no *blind docking* e nos *dockings* direcionados.

Poses/ *Docking*	*Blind Docking* (kcal mol^{-1})	Local *Docking* (kcal mol^{-1}) Sítio 1	Local *Docking* (kcal mol^{-1}) Sítio 2
1	-4,4	-4,8	-4,4
2	-4,2	-4,8	-4,4
3	-4,2	-4,7	-4,3
4	-4,2	-4,6	-4,3
5	-4,2	-4,6	-4,3
6	-4,2	-4,5	-4,2
7	-4,2	-4,5	-4,2
8	-4,1	-4,5	-4,2
9	-4,1	-4,4	-4,2
10	-4,0	-4,4	-4,1
11	-4,0	-4,3	-4,1
12	-4,0	-4,3	-4,1
13	-4,0	-4,2	-4,1
14	-4,0	-4,2	-4,1
15	-3,9	-4,2	-4,0
16	-3,9	-4,1	-3,9
17	-3,9	-4,1	-3,9
18	-3,9	-4,0	-3,9
19	-3,9	-3,9	-3,8
20	-3,7	-3,9	-3,8

Similarmente ao resultado do *blind docking*, os resultados do docking direcionado indicam que o sítio localizado no domínio CT apresenta menor média de escores de docking, logo maior atração, com hexanoato de etila que o sítio localizado no domínio BC. O primeiro possível sítio, localizado no domínio CT da ACC, apresentou escores de docking variando entre -4,8 kcal.mol^{-1} a -3,9 kcal.mol^{-1} e média das vinte poses resultantes do docking direcionado igual a -4,35 kcal.mol^{-1}. O segundo sítio no domínio BC apresentou escores de docking variando entre -4,4 a -3,8 kcal.mol^{-1} e a média das vinte poses igual a -4,1 kcal.mol^{-1} (Tabela 4).

As vinte poses indicadas no *docking* direcionado no primeiro provável sítio de interação localizado no domínio CT da ACC apresentaram alta similaridade conformacional com poucas variações entre as poses, mas essas pequenas diferenças nas conformações resultam em uma variação nos escore de *docking* (Tabela 4, Figura 12A e 12B). Diante desse resultado, a primeira pose com menor escore de docking, logo maior atração do ligante pela proteína, foi utilizada para analisar as interações nesse sítio.

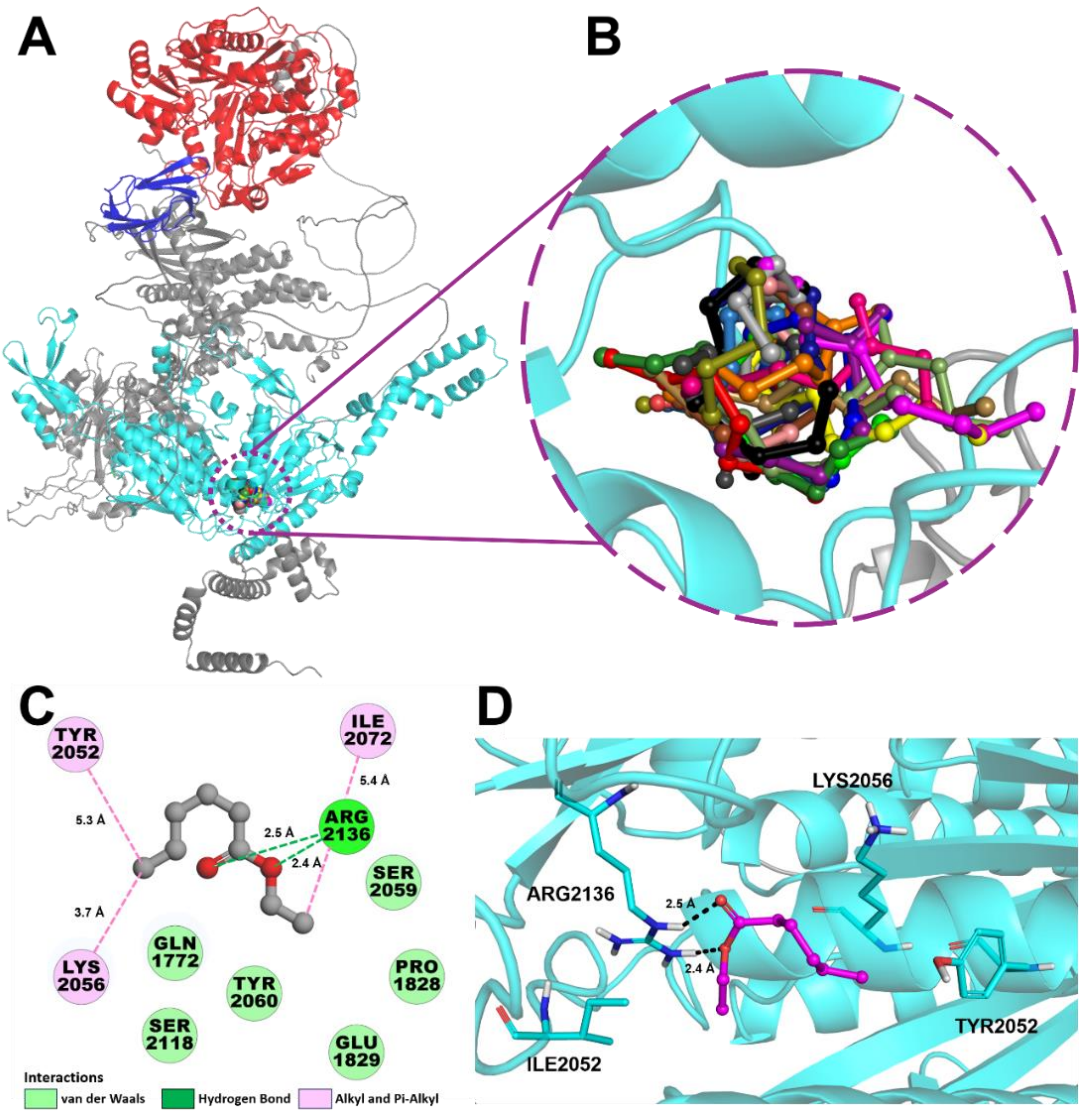


Figura 12 - *Docking molecular* direcionado do hexanoato de etila no primeiro possível sítio de interação, domínio carboxil transferase (CT), da enzima Acetil-CoA Carboxilase (ACC).

Hexanoato de etila estabelece duas ligações de hidrogênio com o resíduo de aminoácido ARG2136 da ACC. Essa interação ocorre entre os átomos de oxigênio do grupamento éster do ligante com os nitrogênios da cadeia lateral do resíduo de aminoácido ARG2136. Além das ligações de hidrogênio, observa-se também interações alquil e π-alquil com os resíduos TYR2052, LYS2056 e ILE2072. Adicionalmente, nota-se interações de van der Waals entre o hexanoato de etila com os resíduos GLN1772, PRO1828, GLU1829, SER2059, TYR2060 e SER2118 da proteína ACC (Figura 12C e 12D).

De forma semelhante ao realizado no primeiro possível sítio de interação, realizou-se um docking molecular direcionado no segundo sítio de interação, indicado no *blind docking*, do hexanoato de etila na ACC. As conformações resultantes no segundo sítio, domínio

responsável pela carboxilação da biotina (BC), também apresentaram alta similaridade, com pequenas variações, mas com diferenças nos escores de *docking* (Tabela 4, Figura 13A e 13B). Escolheu-se a pose com menor escore de *docking*, logo maior atração pela proteína, para analisar as interações estabelecidas entre o ligante e a proteína.

.

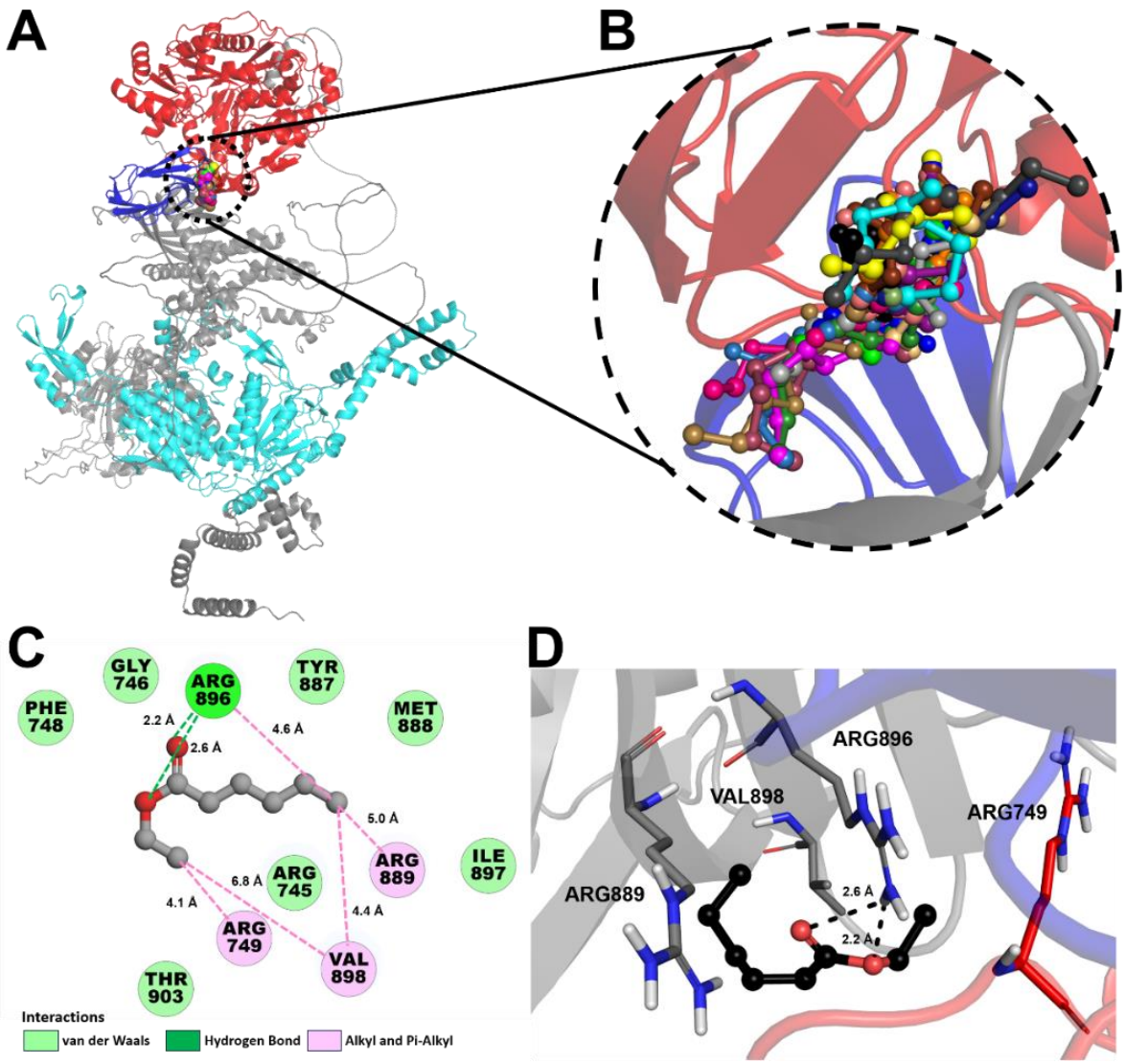


Figura 13 - *Docking* molecular direcionado do Hexanoato de etila no segundo possível sítio de interação, domínio responsável pela carboxilação da biotina (BC), da enzima Acetil-CoA Carboxilase (ACC).

Nesse segundo sítio, o hexanoato de etila estabelece interações de van der Waals com os resíduos ARG745, GLY746, PHE748, TYR887, MET888, ILE897 e THR903. Os resíduos de aminoácido ARG749, ARG889 e VAL898 da ACC interagem com o ligante através de interações fracas do tipo alquil e π-alquil. Duas ligações de hidrogênio entre o grupamento éster

do hexanoato de etila e o resíduo ARG896 da ACC são observadas nesse segundo sítio (Figura 13C e 13D).

Embora as ACCs em humanos, plantas e microrganismos tenham sido extensivamente estudadas, as ACCs de insetos, cruciais para a biossíntese de lipídios e processos fisiológicos, permanecem relativamente inexploradas. Os insetos e outros invertebrados possuem um único gene ACC, crucial para diversos processos fisiológicos e para a biossíntese de lipídios (Wang *et al*., 2024). Dessa forma, a inibição de ACC em insetos interrompe a produção de lipídios essenciais, que são vitais para a estrutura celular, armazenamento de energia e produção de hormônios (Lummen *et al*., 2014). A interrupção da síntese de lipídios pode levar à morte do inseto por inanição energética ou falha no desenvolvimento.

A pesquisa sobre inibidores de ACC em insetos ainda é um campo ativo e em evolução, uma vez que o mercado de inseticidas tem se concentrado tradicionalmente em compostos que atuam nas funções nervosas e musculares (Toprak; Musselman, 2021). Desenvolvimentos recentes introduziram novas composições químicas baseadas em derivados de ácido tetrônico/tetrâmico (grupo 23 da classificação de modo de ação do IRAC), inibidores da biossíntese de lipídios que atuam sobre a ACC, utilizados para o controle de pragas sugadoras, como moscas-brancas, pulgões e ácaros (Sparks; Nauen, 2015). Estes inseticidas representam uma alternativa vantajosa devido ao seu perfil ecotoxicológico favorável, pois são compatíveis com abelhas polinizadoras manejadas e agentes de controle biológico (Lueke *et al*., 2020).

Nosso estudo é pioneiro no uso do óleo essencial da polpa do fruto de pequi para o controle de *B. tabaci*, com desempenho superior ao do inseticida comercial tiametoxam, provavelmente devido ao hexanoato de etila atuar como componente ativo. No entanto, estudos adicionais são necessários para confirmar o mecanismo de ação na ACC demonstrado por acoplamento molecular, bem como para avaliar a interação na inibição de outras enzimas de insetos. Estudos futuros avaliando sua eficácia em ovos e ninfas de *B. tabaci* MEAM1, insetos-praga de outras espécies e insetos não-alvo são cruciais, além da realização de testes de campo.

4.5 Conclusões

O óleo essencial da polpa do fruto de *C. brasiliense* apresenta atividade inseticida promissora contra adultos de *B. tabaci* MEAM1, associada principalmente à presença de ésteres, predominantemente hexanoato de etila, em sua composição química. A nanoemulsão formulada a partir do óleo essencial apresenta eficácia *in vitro* comparável à do inseticida sintético tiametoxam 24 h após o tratamento de folhas de soja em doses de 10.000 e 20.000 ppm. Embora a nanoemulsão apresente menor mortalidade imediata do que o óleo essencial in natura após 72 h de exposição, ela apresenta um perfil fitossanitário superior, não induzindo sintomas de fitotoxicidade em folhas de soja, permitindo a liberação gradual de compostos bioativos e contribuindo para maior persistência ao longo do tempo.

Estudos de acoplamento molecular sugerem que o hexanoato de etila atua inibindo a acetil-CoA carboxilase de *B. tabaci* MEAM1, indicando que interfere em vias metabólicas essenciais relacionadas à biossíntese de lipídios em insetos. Os resultados da ancoragem cega sugerem inibição enzimática em dois possíveis sítios de interação nos domínios CT e BC, e a ancoragem direcionada indica que o sítio no domínio CT apresenta maior afinidade pelo hexanoato de etila. Em conjunto, os resultados apoiam a continuidade dos estudos com formulações nanoestruturadas em condições de campo e seu potencial integração em programas de manejo integrado de pragas como uma alternativa mais sustentável ao controle químico convencional.

REFERÊNCIAS

ABBOTT, W. S. A method of computing the effectiveness of an insecticide. **Journal of Economic Entomology**, v. 18, n. 2, p. 265-267, 1925.

ABD-ELNABI, A. D.; EL-SAWY, E. F.; BADAWY, M. E. I. Plant oil nanoemulsions as a potential solution for pest control in sustainable agriculture. **Neotropical Entomology**, v. 54, n. 1, p. 35-47, 2025.

ABRAMSON, J.; ADLER, J.; DUNGER, J.; EVANS, R.; GREEN, T.; PRITZEL, A.; RONNEBERGER, O.; WILLMORE, L.; BALLARD, A. J.; BAMBRICK, J.; JUMPER, J. M. Accurate structure prediction of biomolecular interactions with AlphaFold 3. **Nature**, v. 630, n. 8016, p. 493-500, 2024.

ANNADURAI, K. S.; CHANDRASEKARAN, N.; VELRAJA, S.; HIKKU, G. S.; PARVATHI, V. D. Essential oil nanoemulsion: an emerging eco-friendly strategy towards mosquito control. **Acta Tropica**, v. 257, p. 107290, 2024.

ANSARI, M. S.; MORAIET, M. A.; AHMAD, S. Insecticides: impact on the environment and human health. In: MALIK, A.; GROHMANN, E.; AKHTAR, R. (ed.). **Environmental deterioration and human health: natural and anthropogenic determinants**. Dordrecht: Springer Netherlands, 2013. p. 99-123.

ARAÚJO, M. F.; CASTANHEIRA, E. M.; SOUSA, S. F. The buzz on insecticides: a review of uses, molecular structures, targets, adverse effects, and alternatives. **Molecules**, v. 28, n. 8, p. 3641, 2023.

AVELINO, L. D.; PORTELA, G. L. F.; GIRÃO, J. E. F.; MELO, L. C. J. Repelência de óleos essenciais e vegetais sobre pulgão-preto *Aphis craccivora* Koch na cultura do feijão-fava (*Phaseolus lunatus* L.). **Revista Verde de Agroecologia e Desenvolvimento Sustentável**, v. 14, n. 1, p. 21-26, 2019.

AYLLÓN-GUTIÉRREZ, R.; DÍAZ-RUBIO, L.; MONTAÑO-SOTO, M.; HARO-VÁZQUEZ, M. P.; CÓRDOVA-GUERRERO, I. Applications of plant essential oils in pest control and their encapsulation for controlled release: a review. **Agriculture**, v. 14, n. 10, p. 1766, 2024.

AZEVEDO, F. R.; FERREIRA, R. C. A. B.; LEANDRO, C. S.; ARAÚJO, I. M.; TINTINO, S. R. Use of essential oils from plants of Araripe National Forest against *Aedes aegypti* (Diptera: Culicidae). **Brazilian Journal of Biology**, v. 83, p. e275062, 2023.

BATEMAN, A.; MARTIN, M.-J.; ORCHARD, S.; MAGRANE, M.; ADESINA, A.; AHMAD, S.; BOWLER-BARNETT, E. H.; BYE-A-JEE, H.; ZARU, R. UniProt: the universal protein knowledgebase in 2025. **Nucleic Acids Research**, v. 53, n. 1, p. 609-D617, 2025.

BROWNSEY, R. W.; DENTON, R. M. Acetyl-coenzyme A carboxylase. **The Enzymes**, v. 18, p. 123-146, 1987.

CAMPOS, E. V.; PROENÇA, P. L.; OLIVEIRA, J. L.; BAKSHI, M.; ABHILASH, P. C.; FRACETO, L. F. Use of botanical insecticides for sustainable agriculture: future perspectives. **Ecological Indicators**, v. 105, p. 483-495, 2019.

COITINHO, R. L. B. C.; OLIVEIRA, J. V.; GONDIM, M. G. C. J.; CÂMARA, C. A. G. Atividade inseticida de óleos vegetais sobre *Sitophilus zeamais* Mots. (Coleoptera: Curculionidae) em milho armazenado. **Revista Caatinga**, v. 19, n. 2, p. 176-182, 2006.

CORDEIRO, M. W. S.; CAVALLIERI, Â. L. F.; FERRI, P. H.; NAVES, M. M. V. Características físicas, composição químico-nutricional e dos óleos essenciais da polpa de *Caryocar brasiliense* nativo do estado de Mato Grosso. **Revista Brasileira de Fruticultura**, v. 35, n. 4, p. 1127-1139, 2013.

COUTINHO, D. S.; PIRES, J.; GOMES, H.; POHLMANN, A. R.; GUTERRES, S. S.; SILVA, P. M. R.; MARTINS, M. A.; FERRARINI, S. R.; BERNARDI, A. Pequi (*Caryocar brasiliense* Cambess.)-loaded nanoemulsion, orally delivered, modulates inflammation in LPS-induced acute lung injury in mice. **Pharmaceutics**, v. 12, n. 11, p. 1075, 2020.

DAMIANI, C.; VILAS BOAS, E. V. B.; FERRI, P. H.; PINTO, D. M.; RODRIGUES, L. J. Volatile compounds profile of fresh-cut pequi fruit stored under different temperatures. **Journal of Food Science and Technology**, v. 29, n. 2, p. 435-439, 2009.

EBERHARDT, J.; SANTOS-MARTINS, D.; TILLACK, A. F.; FORLI, S. AutoDock Vina 1.2.0: new docking methods, expanded force field, and Python bindings. **Journal of Chemical Information and Modeling**, v. 61, n. 8, p. 3891-3898, 2021.

GEŐCZE, K. C.; BARBOSA, L. C. A.; FIDÊNCIO, P. H.; SILVÉRIO, F. O.; LIMA, C. F.; BARBOSA, M. C. A.; ISMAIL, F. M. Essential oils from pequi fruits from the Brazilian Cerrado ecosystem. **Food Research International**, v. 54, n. 1, p. 1-8, 2013.

GUPTA, A. Nanoemulsions. *In:* MAKHLUF, S. B. (ed.). **Nanoparticles for biomedical applications**. Amsterdam: Elsevier, 2020. p. 371-384.

GUPTA, I.; SINGH, P.; RAGHUWANSHI, R. Plant essential oils as biopesticides: applications and mechanisms. **Plants**, v. 12, n. 16, p. 2916, 2023.

HILLGARTNER, F. B.; CHARRON, T. Arachidonate and medium-chain fatty acids inhibit transcription of the acetyl-CoA carboxylase gene in hepatocytes in culture. **Journal of Lipid Research**, v. 38, n. 12, p. 2548-2557, 1997.

HOROWITZ, A. R.; GHANIM, M.; RODITAKIS, E.; NAUEN, R.; ISHAAYA, I. Insecticide resistance and its management in *Bemisia tabaci* species. **Journal of Pest Science**, v. 93, n. 3, p. 893-910, 2020.

ISMAN, M. B. Botanical insecticides, deterrents, and repellents in modern agriculture and an increasingly regulated world. **Annual Review of Entomology**, v. 51, n. 1, p. 45-66, 2006.

ISMAN, M. B.; GRIENEISEN, M. L. Botanical insecticide research: many publications, limited useful data. **Trends in Plant Science**, v. 19, n. 3, p. 140-145, 2014.

KIM, S.; CHEN, J.; CHENG, T.; GINDULYTE, A.; HE, J.; HE, S.; LI, Q.; SHOEMAKER, B. A.; THIESSEN, P. A.; ... BOLTON, E. E. PubChem 2023 update. **Nucleic Acids Research**, v. 51, n. 1, p. 1373-1380, 2023.

LIMA, A. D.; SILVA, A. M. O.; TRINDADE, R. A.; TORRES, R. P.; MANCINI-FILHO, J. Chemical composition and bioactive compounds in the pulp and almond of pequi fruit. **Revista Brasileira de Fruticultura**, v. 29, p. 695-698, 2007.

LIMA, A. F. N.; COUTINHO, L. A. N.; ALVES, É. C. R. F.; MOURA, I. D. A.; MACEDO, L. L. B. S.; COSTA, V. E. G.; MOURA, C. B. A. Efeito larvicida do extrato da folha de pequi. **Brazilian Journal of Health Review**, v. 5, p. 14598-14615, 2022.

LUCIA, A.; GUZMÁN, E. Emulsions containing essential oils, their components or volatile semiochemicals as promising tools for insect pest and pathogen management. **Advances in Colloid and Interface Science**, v. 287, p. 102330, 2021.

LUEKE, B.; DOURIS, V.; HOPKINSON, J. E.; MAIWALD, F.; HERTLEIN, G.; PAPAPOSTOLOU, K. M.; BIELZA, P.; TSAGKARAKOU, A.; VAN LEEUWEN, T.;

LÜMMEN, P.; KHAJEHALI, J.; LUTHER, K.; VAN LEEUWEN, T. The cyclic keto-enol insecticide spirotetramat inhibits insect and spider mite acetyl-CoA carboxylases by interfering with the carboxyltransferase partial reaction. **Insect Biochemistry and Molecular Biology**, v. 55, p. 1-8, 2014.

MALAVOLTA, E.; VITTI, G. C.; OLIVEIRA, S. A. **Evaluation of the nutritional state of plants: principles and applications**. 1989.

MARQUES, Á. A.; SOUSA, B. N. D.; GUIMARÃES, N. N.; MARTINS, C. D. M.; SILVA, R. V. D. Chemical composition of pequi essential oil (*Caryocar brasiliense*) and nematicidal activity in the control of *Meloidogyne javanica*. **Revista Ceres**, v. 70, n. 5, p. e70505, 2023.

MARTÍNEZ-ROSELL, G.; GIORGINO, T.; DE FABRITIIS, G. PlayMolecule ProteinPrepare: a web application for protein preparation for molecular dynamics simulations. **Journal of Chemical Information and Modeling**, v. 57, n. 6, p. 1511-1516, 2017.

MIRESMAILLI, S.; ISMAN, M. B. Botanical insecticides inspired by plant-herbivore chemical interactions. **Trends in Plant Science**, v. 19, n. 1, p. 29-35, 2014.

MORAIS, H. L. M. D. N.; FEITOSA, T. C.; RODRIGUES, J. G. M.; LIRA, M. G. S.; NOGUEIRA, R. A.; LUZ, T. R. S. A.; MIRANDA, G. S. Hydroalcoholic extract of *Caryocar brasiliense* Cambess. leaves affect the development of *Aedes aegypti* mosquitoes. **Revista da Sociedade Brasileira de Medicina Tropical**, v. 53, p. e20200176, 2020.

MORRIS, G. M.; HUEY, R.; LINDSTROM, W.; SANNER, M. F.; BELEW, R. K.; GOODSELL, D. S.; OLSON, A. J. AutoDock4 and AutoDockTools4: automated docking with selective receptor flexibility. **Journal of Computational Chemistry**, v. 30, n. 16, p. 2785-2791, 2009.

MUSTAFA, I. F.; HUSSEIN, M. Z. Synthesis and technology of nanoemulsion-based pesticide formulation. **Nanomaterials**, v. 10, n. 8, p. 1608, 2020.

OBEREMOK, V. V.; LAIKOVA, K. V.; GNINENKO, Y. I.; ZAITSEV, A. S.; NYADAR, P. M.; ADEYEMI, T. A. A short history of insecticides. **Journal of Plant Protection Research**, v. 55, n. 3, p. 221-226, 2015.

OBEREMOK, V. V.; LAIKOVA, K. V.; ZAITSEV, A. S.; TEMIROVA, Z. Z.; GAL'CHINSKY, N. V.; NYADAR, P. M.; ZUBAREV, I. V. The need for the application of modern chemical insecticides and environmental consequences of their use: a mini review. **Journal of Plant Protection Research**, v. 57, n. 4, 2017.

OLIVEIRA, J. L.; CAMPOS, E. V. R.; GERMANO-COSTA, T.; LIMA, R.; DELLA VECHIA, J. F.; SOARES, S. T.; ANDRADE, D. J.; GONÇALVES, K. C.; NASCIMENTO, J.; POLANCZYK, R. A.; FRACETO, L. F. Association of zein nanoparticles with botanical compounds for effective pest control systems. **Pest Management Science**, v. 75, n. 7, p. 1855-1865, 2019.

OLIVEIRA, M. R. V.; HENNEBERRY, T. J.; ANDERSON, P. History, current status, and collaborative research projects for *Bemisia tabaci*. **Crop Protection**, v. 20, n. 9, p. 709-723, 2001.

OMBREDANE, A. S.; SILVA, L. R. A.; ARAUJO, V. H. S.; COSTA, P. L.; SILVA, L. C.; SAMPAIO, M. C.; LIMA, M. C. F.; VEIGA, V. F. J.; VIEIRA, I. J. C.; AZEVEDO, R. B.; GRAZIELLA, A. G. Pequi oil (*Caryocar brasilense* Cambess.) nanoemulsion alters cell proliferation and damages key organelles in triple-negative breast cancer cells in vitro. **Biomedicine and Pharmacotherapy**, v. 153, p. 113348, 2022.

OSTERTAG, F.; WEISS, J.; MCCLEMENTS, D. J. Low-energy formation of edible nanoemulsions: factors influencing droplet size produced by emulsion phase inversion. **Journal of Colloid and Interface Science**, v. 388, n. 1, p. 95-102, 2012.

PEREIRA, A. C. R. L.; OLIVEIRA, J. V.; GONDIM, M. G. C.; CÂMARA, C. A. G. Atividade inseticida de óleos essenciais e fixos sobre *Callosobruchus maculatus* (Fabr., 1775) (Coleoptera: Bruchidae) em grãos de caupi (*Vigna unguiculata* (L.) Walp.). **Ciência e Agrotecnologia**, v. 32, n. 3, p. 717-724, 2008.

PINHEIRO, A. C.; OMBREDANE, A. S.; PINHEIRO, W. O.; ANDRADE, L. R.; SILVA, V. R. P.; FELICE, G. J.; ALVES, D. S.; ALBERNAZ, A. F.; SILVEIRA, A. P.; LIMA, M. C. F. Evaluation of biocompatibility, anti-inflammatory, and antinociceptive activities of pequi oil-based nanoemulsions in vitro and in vivo models. **Nanomaterials**, v. 12, n. 23, p. 4260, 2022.

PINKOSKY, S. L.; SCOTT, J. W.; DESJARDINS, E. M.; SMITH, B. K.; DAY, E. A.; FORD, R. J.; LANGENDORF, C. G.; LING, N. X. Y.; NERO, T. L.; ... STEINBERG, G. R. Long-chain fatty acyl-CoA esters regulate metabolism via allosteric control of AMPK β1 isoforms. **Nature Metabolism**, v. 2, n. 9, p. 873-881, 2020.

REZENDE-TEIXEIRA, P.; DUSI, R. G.; JIMENEZ, P. C.; ESPINDOLA, L. S.; COSTA-LOTUFO, L. V. What can we learn from commercial insecticides? Efficacy, toxicity, environmental impacts, and future developments. **Environmental Pollution**, v. 300, p. 118983, 2022.

RODRIGUES, S. S.; GOMES, S. L.; GASPAR, Y. M. S.; SILVA, M. C. F. E.; SILVA, L. B.; LIMA, S. G.; CANTANHÊDE, W.; ARAÚJO, F. D. S. Nanoemulsion based on *Piper tuberculatum* essential oil for the treatment of the crop pest *Bemisia tabaci* biotype B. **Journal of the Brazilian Chemical Society**, v. 36, n. 6, p. e-20250025, 2025.

SANTOS, F. S.; SANTOS, R. F.; DIAS, P. P.; ZANÃO, L. A. J.; TOMASSONI, F. A. Cultura do pequi (*Caryocar brasiliense* Camb.). **Acta Iguazu**, v. 2, n. 3, p. 46-57, 2013.

SARMAH, K.; ANBALAGAN, T.; MARIMUTHU, M.; MARIAPPAN, P.; ANGAPPAN, S.; VAITHIYANATHAN, S. Innovative formulation strategies for botanical- and essential oil-based insecticides. **Journal of Pest Science**, v. 98, n. 1, p. 1-30, 2025.

SOLANS, C.; IZQUIERDO, P.; NOLLA, J.; AZEMAR, N.; GARCIA-CELMA, M. J. Nano-emulsions. **Current Opinion in Colloid and Interface Science**, v. 10, n. 3-4, p. 102-110, 2005.

SOLANS, C.; SOLÉ, I. Nano-emulsions: formation by low-energy methods. **Current Opinion in Colloid and Interface Science**, v. 17, n. 5, p. 246-254, 2012.

SOUZA, M. D. D. C.; GIUSTOLIN, T. A.; ALVARENGA, C. D.; COSTA, J. N. J.; ASPIAZÚ, I. Aqueous extract of pequi fruit to control *Spodoptera frugiperda* in corn. **Arquivos do Instituto Biológico**, v.85, 1-5, e0072017, 2018

SPARKS, T. C.; NAUEN, R. IRAC: mode of action classification and insecticide resistance management. **Pest Management Science**, v. 71, n. 2, p. 159-167, 2015.

TOPRAK, U.; MUSSELMAN, L. From cellular biochemistry to systems physiology: new insights into insect lipid metabolism. **Insect Biochemistry and Molecular Biology**, v. 133, p. 103585, 2021.

VALKOVSZKI, N. J.; SZALÓKI, T.; SZÉKELY, Á.; KUN, Á.; KOLOZSVÁRI, I.; ZIMA, I. S.; TAVASZI-SÁROSI, S.; JANCSÓ, M. Influence of soil types on the morphology, yield, and essential oil composition of common sage (*Salvia officinalis* L.). **Horticulturae**, v. 9, n. 9, p. 1037, 2023.

VAN DEN DOOL, H.; KRATZ, P. D. J. A. A generalization of the retention index system including linear temperature programmed gas-liquid partition chromatography. **Journal of Chromatography**, v. 11, p. 463-471, 1963.

WANG, D.; NIU, X.; ZHU, L.; ZHANG, R.; HUANG, Q.; JIAO, P.; GAO, Y. Structure of the endogenous insect acetyl-CoA carboxylase carboxyltransferase domain. **Journal of Biological Chemistry**, v. 300, n. 1, p. 107800, 2024.

WU, J.; GE, L.; LIU, F.; SONG, Q.; STANLEY, D. Pesticide-induced planthopper population resurgence in rice cropping systems. **Annual Review of Entomology**, v. 65, n. 1, p. 409-429, 2020.

YAMMINE, J.; CHIHIB, N. E.; GHARSALLOUI, A.; ISMAIL, A.; KARAM, L. Advances in essential oils encapsulation: development, characterization and release mechanisms. **Polymer Bulletin**, v. 81, n. 6, p. 3837-3882, 2024.

ZHAO, H.; LI, G.; CUI, X.; WANG, H.; LIU, Z.; YANG, Y.; XU, B. Review on effects of some insecticides on honey bee health. **Pesticide Biochemistry and Physiology**, v. 188, p. 105219, 2022.

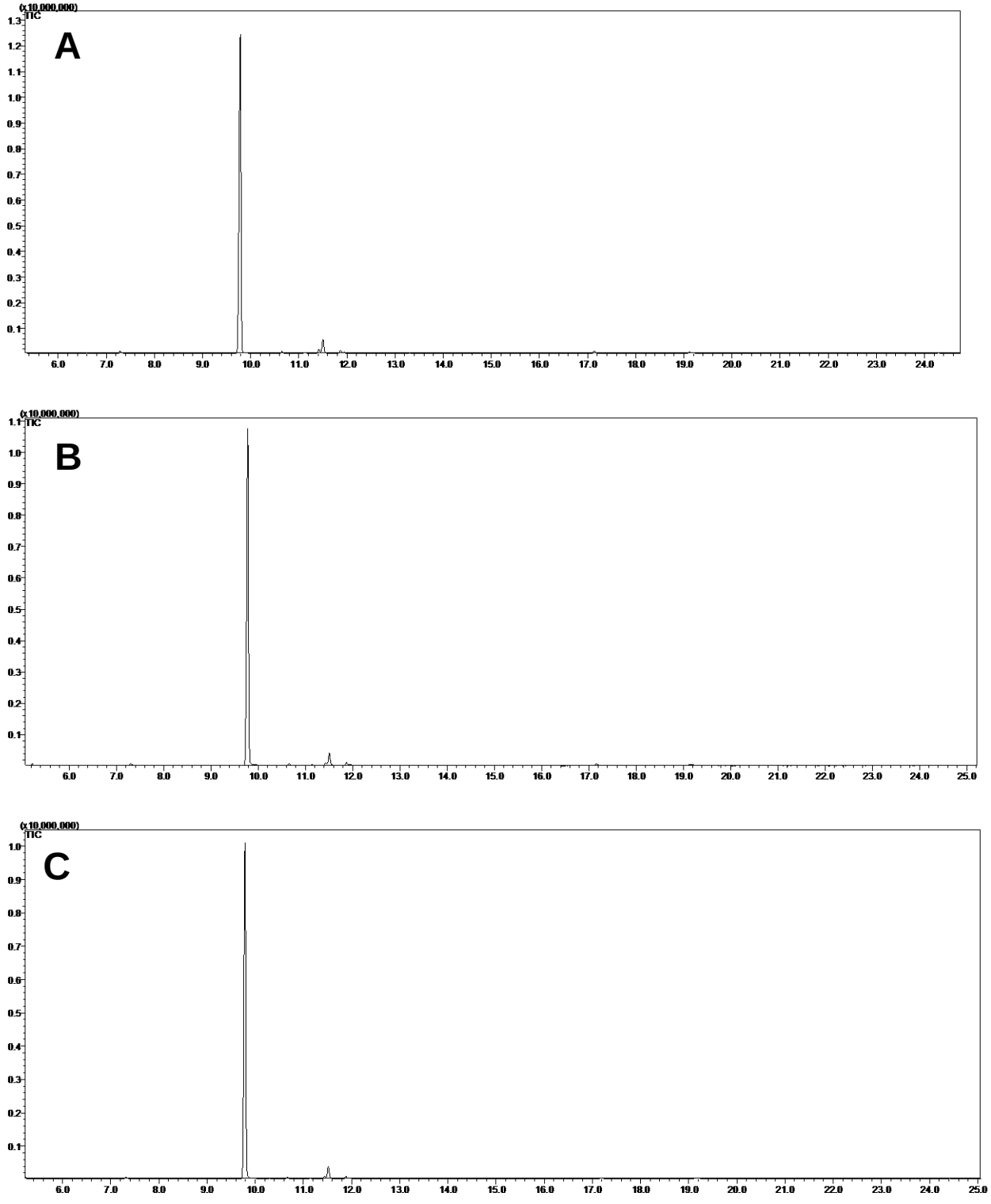
ZU, X.; ZHONG, J.; LUO, D.; TAN, J.; ZHANG, Q.; WU, Y.; LIU, J.; CAO, R.; WEN, G.; CAO, D. Chemical genetics of acetyl-CoA carboxylases. **Molecules**, v. 18, n. 2, p. 1704-1719, 2013.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS E PERSPECTIVAS FUTURAS

Os resultados obtidos neste estudo confirmam o potencial inseticida do óleo essencial da polpa de *C. brasiliense* no controle de *B. tabaci* MEAM1, evidenciando sua eficácia tanto na forma *in natura* quanto na forma nanoemulsionada. Embora o óleo essencial *in natura* tenha apresentado maior toxicidade, sua aplicação foi limitada pelos efeitos fitotóxicos observados nas folhas de soja. Por outro lado, a nanoemulsão apresentou elevada eficácia inseticida, semelhante ao inseticida sintético nas maiores concentrações, sem causar fitotoxicidade, demonstrando ser uma alternativa mais segura e promissora para aplicação. As análises de docking molecular indicaram que o hexanoato de etila, composto majoritário do óleo essencial, apresenta interação com a enzima acetil-CoA carboxilase, sugerindo que a inibição da biossíntese de lipídios pode estar relacionada ao mecanismo de ação inseticida. Dessa forma, os resultados reforçam o potencial do óleo essencial de *C. brasiliense*, especialmente na forma nanoemulsionada, como alternativa sustentável aos inseticidas sintéticos no manejo dessa praga. Como perspectivas futuras, são necessários estudos em condições de campo para validar sua eficácia em ambientes reais, bem como avaliações sobre sua segurança para organismos não alvo, persistência no ambiente e viabilidade de produção em maior escala, a fim de viabilizar sua aplicação prática e possível utilização como bioinseticida no manejo sustentável de pragas agrícolas.

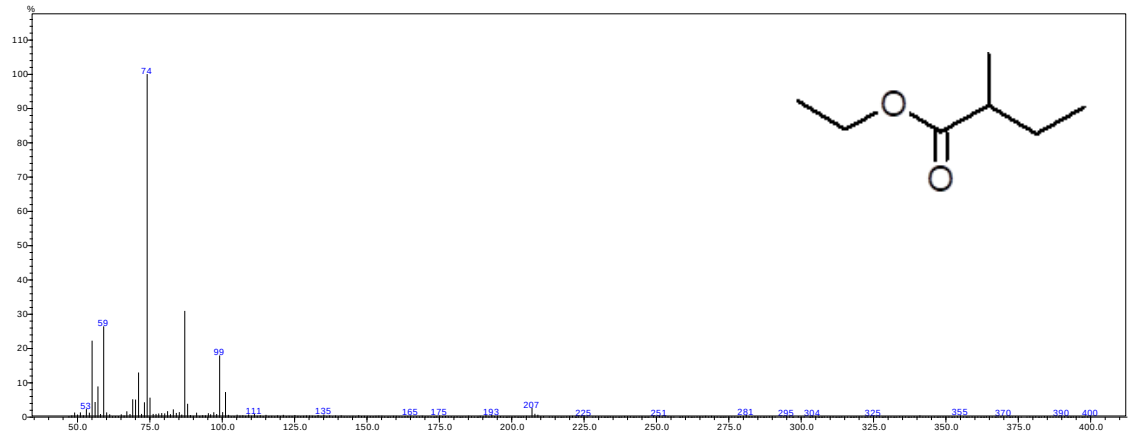
APÊNDICES

Apêndice 1 – Cromatograma do óleo essencial obtido da polpa dos frutos de *C. brasiliense* em A, B e C.

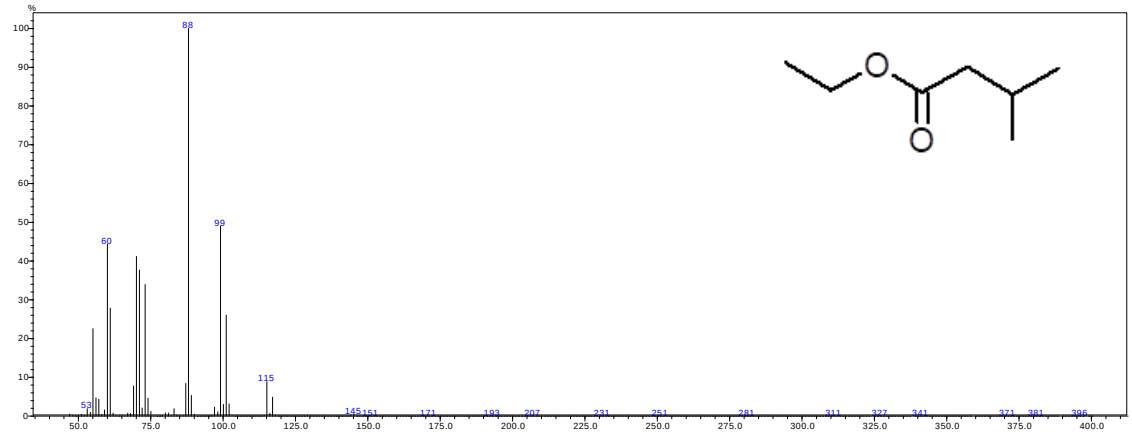


Apêndice 2 - Espectros de massas dos compostos encontrados no óleo essencial da polpa dos frutos de *C. brasiliense*.

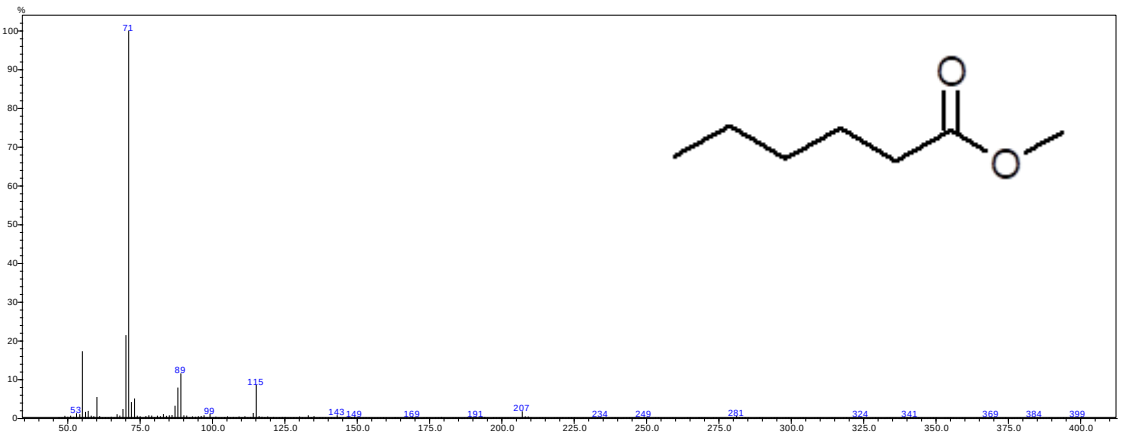
2-Metilbutanoato de etila



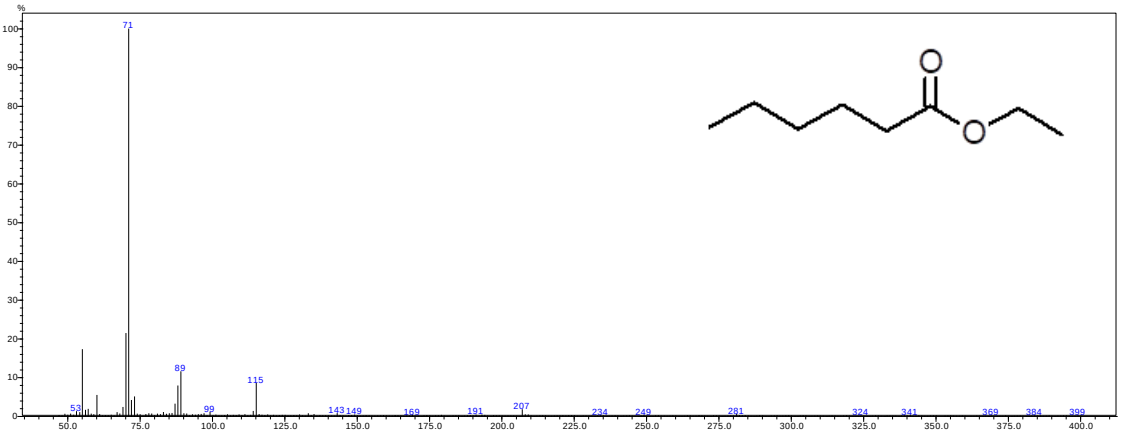
3-Metilbutanoato de etila



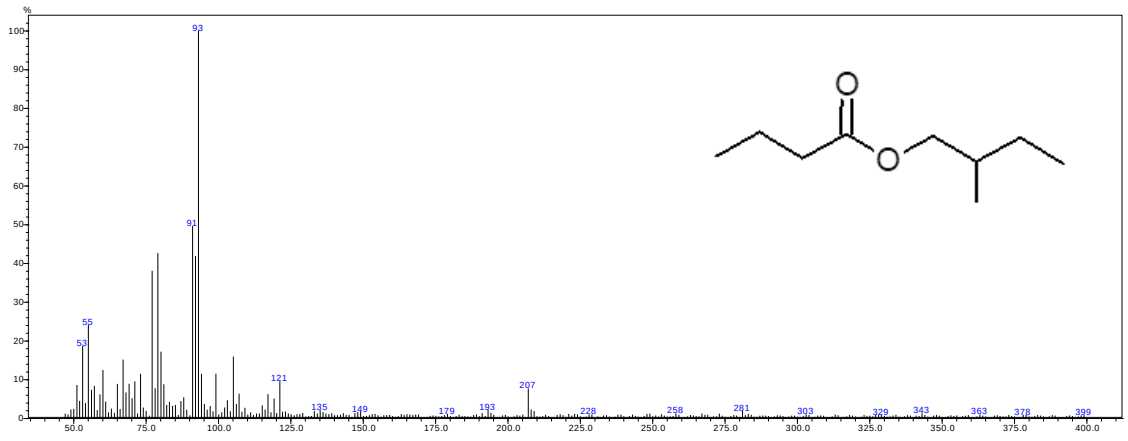
Hexanoato de metila



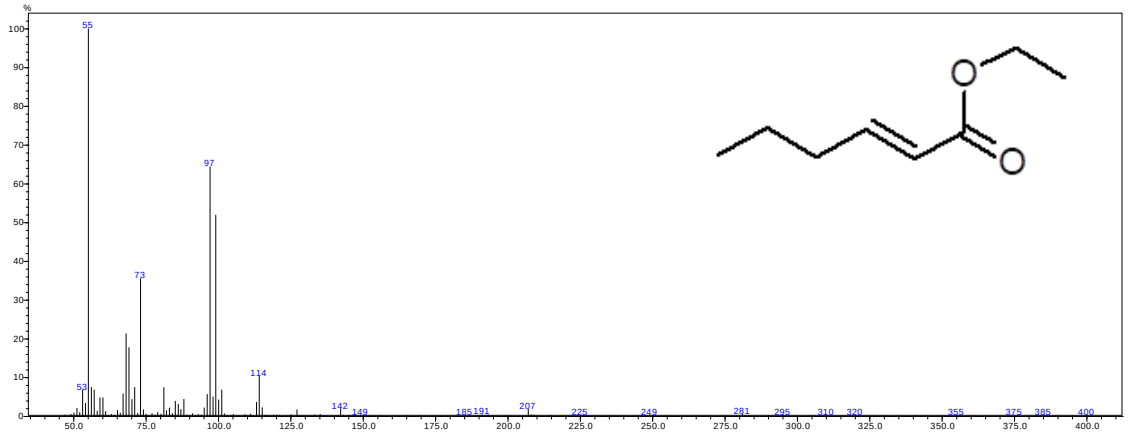
Hexanoato de etila



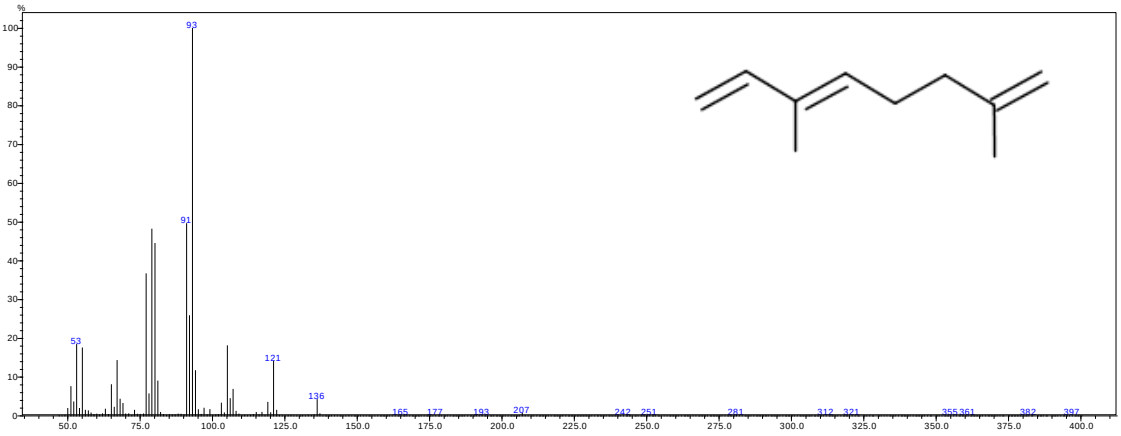
Butirato de 2-metilbutila



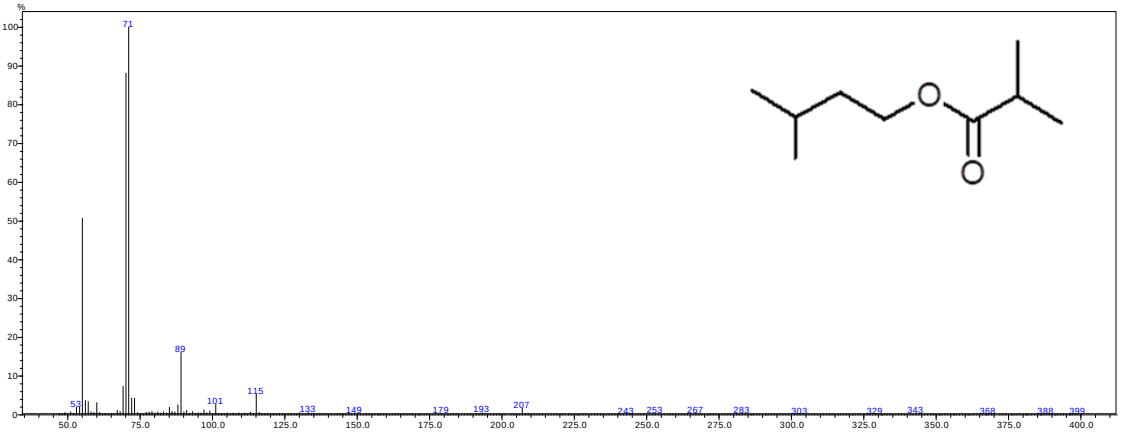
Hex-2-enoato de etila



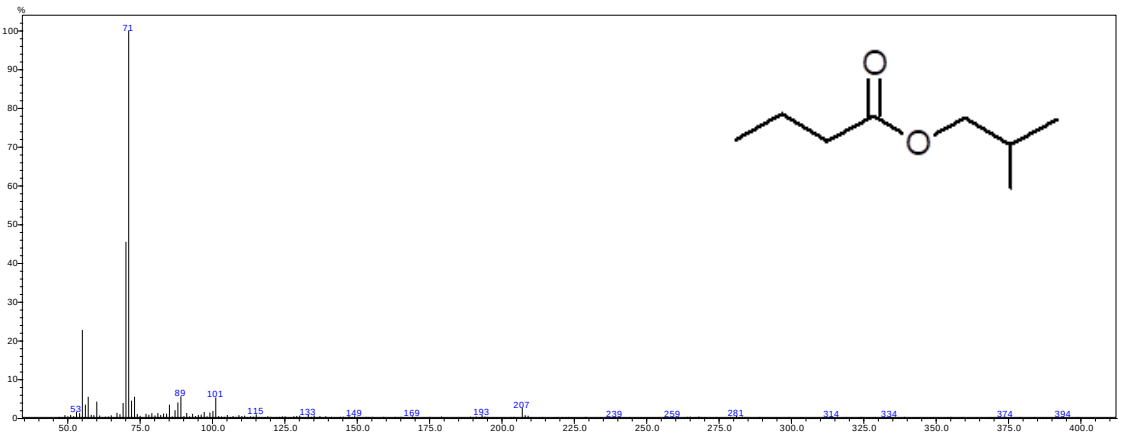
β-Ocimeno



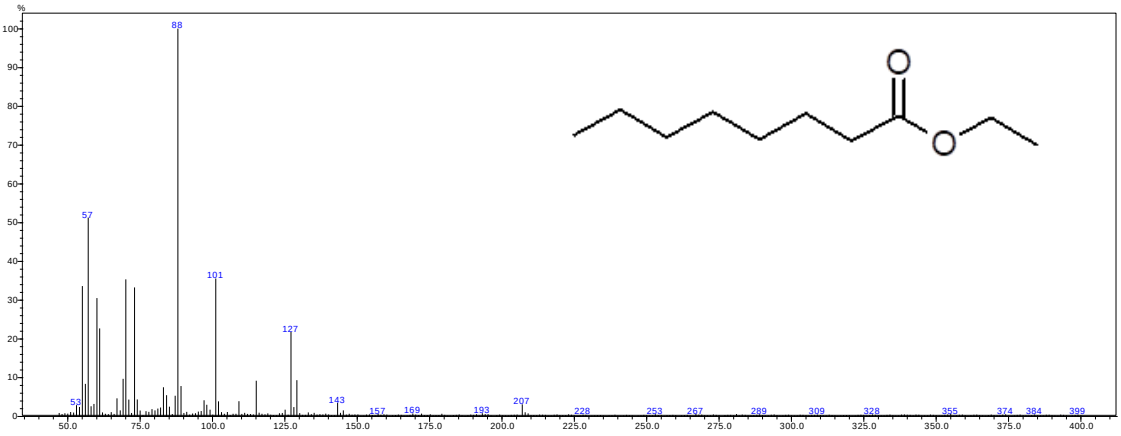
2-Metilpropanoato de isopentila



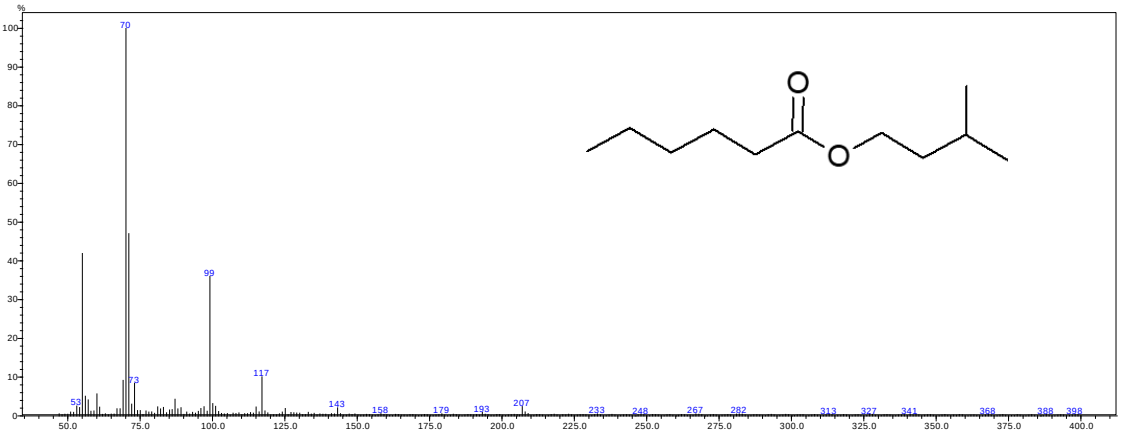
Butirato de 2-metilbutila



Octanoato de etila



Hexanoato de isopentila



Hexanoato de pentila

