



16, 17 e 18 de novembro de 2016.
Campina Grande, Paraíba, Brasil

BIOPROSPECÇÃO DOS POTENCIAIS FARMACOLÓGICOS E TOXICOLÓGICOS DO MONOTERPENO 7-HIDROXICITRONELAL: ESTUDOS *IN SILICO* E *IN VITRO*

Marcus Antônio Bezerra da Silva¹, Abrahão Alves de Oliveira Filho²

RESUMO

Os óleos essenciais de plantas, bem como os compostos derivados destes óleos como os terpenos, têm atraído cada vez mais interesse por causa das suas propriedades antioxidantes. O 7-hidroxicitronelal é um monoterpene derivado do citronelal, apresentando fórmula molecular $C_{10}H_{20}O_2$. Como objetivo principal procurou-se avaliar o perfil de biodisponibilidade oral teórico, bem como as atividades toxicológicas e farmacológicas do monoterpene, entre elas a atividade antioxidante. Para isso, utilizou-se tanto técnicas *in silico*, através do programa PASS online[®], Molinspiration[®] e Osiris[®], quanto *in vitro*, por meio de testes com os radicais DPPH● e NO●. Os resultados mostraram amplo espectro de atividades farmacológicas *in silico*, entre elas efeito antioxidante (Pa 0,239). A atividade antioxidante *in vitro* por sua vez foi considerada moderada, tendo uma porcentagem de inibição máxima de radicais livres de, aproximadamente, 20% para o DPPH● e 40% para o NO●. O perfil de biodisponibilidade oral teórico foi considerado adequado, uma vez que todos os requisitos estabelecidos na regra dos cinco de Lipinski foram atendidos. A análise toxicológica teórica, por sua vez, mostrou probabilidade de a substância apresentar considerável efeito irritante. Assim pôde-se concluir que o monoterpene é portador de atividade antioxidante tanto *in silico* quanto *in vitro*, tem boa biodisponibilidade oral e pode apresentar efeito irritante.

Palavras-chave: Farmacologia, Monoterpenos, Radicais livres

¹ Estudante de Odontologia, Unidade Acadêmica de Ciências Biológicas, UFCG, Patos, PB, E-mail: marcusantonyo27@hotmail.com

² Farmacêutico-Bioquímico - UFPB. Doutor, Unidade Acadêmica de Ciências Biológicas-CSTR, UFCG, Patos, PB, E-mail: abrahao.farm@gmail.com



16, 17 e 18 de novembro de 2016.
Campina Grande, Paraíba, Brasil

BIOPROSPECTING OF PHARMACOLOGICAL AND TOXICOLOGICAL POTENTIAL OF MONOTERPENE 7-HYDROXYCITRONELLAL: STUDIES IN SILICO AND IN VITRO

Marcus Antônio Bezerra da Silva¹, Abrahão Alves de Oliveira Filho²

ABSTRACT

The essential oils of plants, as well as compounds derived from these oils such as terpenes, have attracted increasing interest because of their antioxidant properties. 7-hidroxicitronellal is a monoterpene derived from citronellal, with molecular formula of $C_{10}H_{20}O_2$. The main objective sought to evaluate the profile of theoretical oral bioavailability as well as the toxicological and pharmacological activities of monoterpene, including antioxidant activity. For this, it used both in silico techniques through PASS Online[®], Molinspiration[®] and Osiris[®] programs, and *in vitro*, by testing with DPPH● and NO● radicals. The results showed broad spectrum of pharmacological activities in silico, including antioxidant effects (Pa 0.239). The in vitro antioxidant activity in turn was considered moderate, having a percentage of maximal inhibition of free radical approximately 20% to DPPH● and 40% for NO●. The theoretical oral bioavailability profile was considered appropriate, since all the requirements of the rule of five Lipinski were met. The theoretical toxicological analysis, in turn, showed the probability of substance have considerable irritant effect. Therefore it could be concluded that the monoterpene is antioxidant activity carrier both in silico and in vitro, have good oral bioavailability and may have irritating effect.

Keywords: Pharmacology, Monoterpenes, Free Radicals