



## **ANÁLISE DA ATIVIDADE FARMACOLÓGICA E TOXICOLÓGICA DO MONOTERPENO NERAL: UM ESTUDO *IN SILICO*.**

**José Henrique de Araújo Cruz<sup>1</sup>, Maria Angélica Sátyro Gomes Alves<sup>2</sup>**

### **RESUMO**

As plantas medicinais são capazes de fornecer fármacos de grande importância clínica, a exemplo dos monoterpenos. Estes são conhecidos por apresentarem uma variedade de efeitos em diferentes sistemas biológicos, justificando a necessidade de pesquisas para investigação do potencial terapêutico e tóxico. Com o avanço tecnológico, modelos *in silico* vêm sendo amplamente aplicados para a avaliação de potenciais atividades farmacológicas e de toxicidade de compostos em ambientes metabólicos de mamíferos. O objetivo deste estudo foi avaliar os efeitos farmacológicos e toxicológicos do monoterpeno Neral, utilizando uma metodologia *in silico*. Inicialmente utilizou-se o software Pubchem<sup>®</sup> para o desenho da molécula, em seguida a análise da probabilidade da atividade da molécula foi realizada com o software Pass Online<sup>®</sup>. Na análise dos parâmetros farmacológicos, foi avaliado a biodisponibilidade oral teórica do Neral, pela “Regra dos Cinco” de Lipinski com o software Molinspiration Cheminformatics. Finalmente, os parâmetros toxicológicos bem como o estudo teórico sobre o efeito carcinogênico, o teste de AMES e a toxicidade oral aguda foi efetuada no programa admetSAR. Os resultados obtidos mostraram que, no Pass Online a molécula do Neral possui 14 possíveis atividades farmacológicas relacionadas à Odontologia, dentre elas potencial antifúngico, anti-inflamatória e antibacteriana; no Molinspiration a molécula do Neral demonstrou estar de acordo com as cinco regras propostas por Lipinsk, logo, apresentando boa biodisponibilidade oral teórica e, pelo teste de toxicidade do admetSAR, apesar de apresentar baixo risco de toxicidade teórica oral, revelou leve potencial carcinogênico.

**Palavras-chave:** Biodisponibilidade Oral, Toxicidade, Bioatividade, Metabólitos Secundários.

<sup>1</sup>Aluno do Curso de Odontologia, UACB-CSTR, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: henrique\_araujo1992@hotmail.com

<sup>2</sup>Doutora, Professora Adjunta do Curso de Odontologia, UACB-CSTR, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: angelicasatyro@hotmail.com



***ANALYSIS OF PHARMACOLOGICAL AND TOXICOLOGICAL ACTIVITY OF NERAL MONOTERPENE: A STUDY IN SILICO.***

**ABSTRACT**

Medicinal plants are capable of supplying drugs of great clinical importance, such as monoterpenes. These are known to present a variety of effects on different biological systems, justifying the need for research to investigate the therapeutic and toxic potential. With the technological advancement, in silico models have been widely applied for the evaluation of potential pharmacological activities and toxicity of compounds in mammalian metabolic environments. The objective of this study was to evaluate the pharmacological and toxicological effects of Neral monoterpene using an in silico methodology. Initially we used the Pubchem® software for the design of the molecule, then the analysis of the probability of the activity of the molecule was performed with the Pass Online® software. In the analysis of pharmacological parameters, the theoretical oral bioavailability of Neral was evaluated by Lipinski's Rule of Five with Molinspiration Cheminformatics software. Finally, the toxicological parameters as well as the theoretical study on the carcinogenic effect, the AMES test and the acute oral toxicity were carried out in the admetSAR program. The results obtained showed that, in Pass Online, the molecule of Neral has 14 possible pharmacological activities related to Dentistry, among them antifungal, anti-inflammatory and antibacterial potential; in Molinspiration the Neral molecule was shown to be in agreement with the five rules proposed by Lipinsk, thus presenting good theoretical oral bioavailability and, by the toxicity test of admetSAR, despite presenting low risk of oral theoretical toxicity, revealed a slight carcinogenic potential.

**Keywords:** Oral bioavailability, Toxicity, Bioactivity, Secondary metabolites.