



**ANÁLISE DA ATIVIDADE FARMACOLÓGICA E TOXICOLÓGICA DO
MONOTERPENO BORNEOL: UM ESTUDO *IN SILICO***

Maria de Fátima Vieira Alves¹, Maria Angélica Satyro Gomes Alves²

RESUMO

Na odontologia tem aumentado o número de pesquisas com produtos naturais por estes apresentarem maior atividade farmacológica, menor toxicidade, maior biocompatibilidade e por serem mais acessíveis e de baixo custo para população. Dentre estes produtos, os monoterpenos apresentam um importante papel atribuído ao efeito terapêutico dos compostos de origem vegetal. No entanto, a descoberta de novos fármacos desenvolvidos a partir de plantas medicinais, é um problema devido a complexidade das moléculas oriundas de plantas medicinais. Devido a isso tem aumentado uso das ferramentas computacionais como um meio para auxiliar na avaliação ainda nos estágios iniciais no planejamento de um novo fármaco, analisando previamente aos ensaios *in vitro* e *in vivo* suas propriedades farmacológicas, biodisponibilidade e toxicidade. Diante disso os estudos *in silico* são uma alternativa tendo como vantagem a redução dos custos e do tempo investidos em pesquisa. Neste estudo, o monoterpeno Borneol foi avaliado para o seu efeito farmacológico e toxicológico. Assim, a determinação do perfil farmacológico e toxicidade (ADMET) são parâmetros importantes na definição de biodisponibilidade e efeitos tóxicos de uma molécula. Os softwares Pass on-line, Os ADmestar e Molinspiration foram utilizados no estudo para atividades *in silico*. Modelos *in silico* são aplicadas para a avaliação da toxicidade de compostos em ambientes metabólicos de mamíferos. Os resultados obtidos mostraram que a molécula do

¹Aluno do Curso de Odontologia, UACB-CSTR, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: maria.v.alves1@gamil.com@hotmail.com

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

Borneol possui 10 possíveis atividades farmacológicas relacionadas à Odontologia, apresentando baixo risco de toxicidade teórica oral e carcinogênico.

Palavras-chave: Fitoterapia, Farmacologia, Métodos Alternativos

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

ABSTRACT

In dentistry has increased the number of researches with natural products because they present higher pharmacological activity, lower toxicity, greater biocompatibility and because they are more accessible and low cost for the population.

Among these products, monoterpenes play an important role attributed to the therapeutic effect of compounds of plant origin. However, the discovery of new drugs developed from medicinal plants, is a problem due to the complexity of the molecules from medicinal plants. Due to this has increased use of computational tools as a means to assist in the evaluation in the early stages in the planning of a new drug, analyzing in advance the *in vitro* and *in vivo* tests its pharmacological properties, bioavailability and toxicity. In front of this the *in silico* studies are an alternative having as advantage the reduction of the costs and the time invested in research. In this study, the monoterpene Borneol was evaluated for its pharmacological and toxicological effect. Thus, the determination of pharmacological profile and toxicity (ADMET) are important parameters in the definition of bioavailability and toxic effects of a molecule. The online pass, ADMestar and Molinspiration softwares were used in the study for *in silico* activities. *In silico* models are applied for the evaluation of the toxicity of compounds in metabolic environments of mammals. The results showed that the molecule of Borneol possesses 10 possible pharmacological activities related to Dentistry, presenting low risk of theoretical oral toxicity and being carcinogenic.

Keywords: Phytotherapy, Pharmacology, Alternative Methods