



BIOPROSPECÇÃO DOS POTENCIAIS FARMACOLÓGICOS E TOXICOLÓGICOS DO MONOTERPENO (R)-(+)-CITRONELAL: ESTUDOS *IN SILICO* E *IN VITRO*

Denildo de Araújo Carvalho¹, Abrahão Alves de Oliveira Filho²

RESUMO

Os radicais livres (RL), quando em excesso, podem causar danos ao organismo como, por exemplo, a doença periodontal. Algumas substâncias como os monoterpenos, que são derivados dos óleos essenciais de plantas, atuam como agentes antioxidantes bloqueando o efeito danoso dos RL. Com isso, objetivou-se avaliar as propriedades farmacológicas e toxicológicas do monoterpeno (R)-(+)-citronelal. Na avaliação da atividade antioxidante *in silico* utilizou-se o programa PASS online, para a toxicidade *in silico* utilizou-se o programa admetSar, e para a análise *in vitro* do potencial antioxidante utilizou-se a técnica com o íon ferroso. Os resultados mostraram que o monoterpeno em questão apresentou um amplo espectro de atividades farmacológicas *in silico*, em especial a antioxidante (Pa-0,409, Pi-0,011), apresentou baixa toxicidade teórica, não sendo classificado como carcinogênico e se enquadra na categoria III de toxicidade oral aguda. Na atividade *in vitro*, constatou-se que todas as concentrações testadas foram capazes de inibir o íon ferroso em comparação ao controle. Assim, pôde-se concluir que o monoterpeno apresenta boa atividade antioxidante tanto *in silico* quanto *in vitro*, apresenta baixa toxicidade e não é carcinogênico, o que o torna um possível candidato a fármaco.

Palavras-chave: Farmacologia, Odontologia, Antioxidante.

¹Graduando em Odontologia, Unidade Acadêmica de Ciências Biológicas, UFCG, Patos, PB, e-mail: denildocarvalho@hotmail.com

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



BIOPROSPECTION OF THE PHARMACOLOGICAL AND TOXICOLOGICAL POTENTIALS OF MONOTERPENE (R) - (+) - CITRONELAL: *IN SILICO* AND *IN VITRO* STUDIES

ABSTRACT

Free radicals (FR), when in excess, can cause damage to the body, such as periodontal disease. Some substances such as monoterpenes, which are derived from the essential oils of plants, act as antioxidants blocking the harmful effect of FR. The aim of this study was to evaluate the pharmacological and toxicological properties of monoterpene (R)-(+)-citronellal. In the evaluation *in silico* antioxidant activity, the online PASS program was used for the *in silico* toxicity, the admetSar program was used, and for the *in vitro* analysis of the antioxidant potential the ferrous ion technique was used. The results showed that the monoterpene in question presented a broad spectrum of pharmacological activities *in silico*, especially the antioxidant (Pa-0.409, Pi-0.011), presented low theoretical toxicity, not classified as carcinogenic and falls within category III toxicity Oral. *In vitro* activity, all concentrations tested were able to inhibit the ferrous ion in comparison to the control. Thus, it can be concluded that monoterpene has good antioxidant activity both *in silico* and *in vitro*, presents low toxicity and is not carcinogenic, which makes it a possible drug candidate.

Keywords: Pharmacology, Dentistry, Antioxidant.