



AVALIAÇÃO DO POTENCIAL ANTIOXIDANTE DO MONOTERPENO (S)-(-)-CITRONELAL.

Flávia Bruna Ribeiro Batista¹, Abrahão Alves de Oliveira Filho²

RESUMO

Os radicais livres são formados durante a transferência de elétrons em um processo químico fundamental para a sobrevivência das células, entretanto quando em excesso podem levar a alterações teciduais e ter importante papel nas patologias como no caso da periodontite. Os óleos essenciais originam-se do metabolismo secundário das plantas, sendo constituídos por uma mistura de compostos, entre eles, os monoterpenos, que possuem atividade antioxidante. A presente pesquisa teve como objetivo avaliar atividade antioxidante do monoterpene S-(-)-citronelal. Na avaliação *in silico* utilizou-se o programa PASS online e para a análise *in vitro* do potencial antioxidante utilizou-se a técnica com o íon ferroso. Os resultados mostraram que o monoterpene S-(-)-citronelal apresentou um amplo espectro de atividades farmacológicas *in silico* relacionadas ao potencial antioxidante, em especial a antioxidante (Pa-0,409 , Pi-0.011), sequestradora de radicais livre (PA-0,232 ,Pi-0,053), antimetastático (Pa: 0,505 , Pi-0,019) e anticarcinogênico (Pa: 0,277 , Pi-0,069). Na atividade *in vitro*, constatou-se que as concentrações testadas de 400, 800 e 1000 µg/mL foram capazes de inibir o íon ferroso em comparação ao controle. Pôde-se concluir que o monoterpene apresenta boa atividade antioxidante tanto *in silico* quanto *in vitro*, o que o torna um possível candidato a fármaco.

Palavras-chave: Periodontite, Monoterpene, Antioxidante.

¹Graduando em Odontologia, Unidade Acadêmica de Ciências Biológicas, UFCG, Patos, PB, e-mail: flaviabruna95@hotmail.com

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



**EVALUATION OF MONOTERPENE ANTIOXIDANT POTENTIAL
(S)-(-)- CITRONELAL.**

ABSTRACT

Free radicals are formed during electron transfer in a fundamental chemical process for cell survival, but when too much can lead to tissue changes and play an important role in pathologies such as periodontitis. Essential oils originate from the secondary metabolism of plants, being made up of a mixture of compounds, including monoterpenes, which have antioxidant activity. This research aimed to evaluate the antioxidant activity of monoterpene S - (-) - citronellal. For in silico evaluation, the PASS online program was used and for the in vitro analysis of the antioxidant potential, the ferrous ion technique was used. The results showed that the S - (-) - citronellal monoterpene presented a broad spectrum of in silico pharmacological activities related to antioxidant potential, especially antioxidant (Pa-0.409, Pi-0.011), free radical scavenger (PA-0.232, Pi-0.053), antimetastatic (Pa: 0.505, Pi-0.019) and anticarcinogenic (Pa: 0.277, Pi-0.069). In vitro activity, it was found that the tested concentrations of 400, 800 and 1000 µg / mL were able to inhibit the ferrous ion compared to the control. It can be concluded that monoterpene has good antioxidant activity both in silico and in vitro, which makes it a possible drug candidate.

Keywords: Periodontitis, Monoterpene, Antioxidant.