

## I CONGRESSO ONLINE DE BIOTECNOLOGIA, INOVAÇÃO E COMUNIDADES DE CONHECIMENTO

### **AVALIAÇÃO DA TOXICIDADE DOS PRINCIPAIS COMPONENTES DOS ÓLEOS ESSENCIAIS DE *Curcuma longa* L.**

**COSTA, Jhone Robson da Silva<sup>1</sup>; CUTRIM, Naara Rayane Moura<sup>2</sup>; CITÓ Thiago primo Bandeira<sup>3</sup>.**

**Introdução:** A *Curcuma longa* L. é uma espécie nativa da Índia e Indonésia, no Brasil é conhecida popularmente por açafrão da terra, cúrcuma, gengibre amarelo e raiz de sol, tem sido muito utilizado na medicina popular da região por sua atividade anti-inflamatória e antiviral. Também é uma espécie citada na relação de plantas medicinais de interesse ao sus (Resus) e indicada como planta medicinal para uso pela população, o que estimula o estudo dessa espécie com a finalidade de melhor caracterizar suas propriedades terapêuticas. Nesse sentido, embora tenha diversas atribuições positivas, é essencial analisar a toxicidade dos seus constituintes químicos, como o terpineol, Linalol e a Curlona, que são encontrados em todos os órgãos do vegetal (SUETH-SANTIAGO et al., 2015), com a finalidade de ampliar e buscar parâmetros de utilização dos seus benefícios. **Objetivo:** avaliar a toxicidade do terpineol, Linalol e a Curlona *in silico*. **Método:** As moléculas 2-(4-metilciclohex-3-en-1-il) propan-2-ol (terpineol), 3,7-dimetilocta-1,6-dien-3-ol (Linalol) e a 2-metil-6-(4-metilidenociclo-hex-2-en-1-il) hept-2-en-4-ona (Curlona), tiveram suas estruturas 3D desenhadas e otimizadas no programa Avogrado, para então o código fonte de suas estruturas 3D otimizadas serem inseridas na aplicação online PreADMET, para previsão das propriedades toxicológicas. **Resultados:** Ao final da análise foi possível observar que somente a Curlona apresenta predição a carcinogenicidade, já para o teste ames o Linalol e Terpineol se apresentaram como mutagênicos. Além disso, nenhuma das substâncias apresentaram predição a toxicidade em crustáceo (daphnia), algas ou peixes (medaka). A toxicidade oral aguda em ratos predita para o linalol, curlona e terpineol foram (LD<sub>50</sub>): 2,338 kg/mol, 2.851 kg/mol, 2.137 kg/mol, respectivamente. **Considerações finais:** dessa maneira, as substâncias aqui estudadas apresentam toxicidade como mutagenicidade e carcinogenicidade, contudo como a toxicidade é dose dependente é importante estudar essas moléculas em um modelo *in vitro* ou *in vivo* para melhor caracterizar seus efeitos tóxicos.

**Palavras Chave:** *Curcuma longa*; *in silico*; Toxicidade.

1 Universidade Federal do Maranhão, São Luís, Maranhão. jhonecosta2020@gmail.com.

2 Universidade Federal do Maranhão, São Luís, Maranhão. thiagoprmo17@gmail.com.

3 Universidade Federal do Maranhão, São Luís, Maranhão. rayanenaara@gmail.com.

4 Universidade Federal do Maranhão, São Luís, Maranhão. fabiodesouza8@gmail.com.