

AVALIAÇÃO TOXICOLÓGICA DE COMPONENTES QUÍMICOS DAS FOLHAS DE *Ocimum gratissimum* L.

COSTA, Jhone Robson da Silva¹; CITÓ, Thiago primo Bandeira²; CUTRIM, Naara Rayane Moura³

Introdução: *Ocimum gratissimum* L. (Lamiaceae), conhecido popularmente como Alfavaca-cravo, é um subarbusto lenhoso, ereto, com até 1,0 m de altura, originário da Ásia e África e subspontâneo em todo território brasileiro. Essa espécie apresenta propriedades medicinais importantes e por isso é largamente utilizada no Brasil como medicamento complementar à alopatia. O óleo essencial presente nas suas folhas tem ação inibitória sobre organismos altamente patogênicos, como *Staphylococcus aureus*, *Bacillus* spp, *Pseudomonas aeruginosae* e *Leishmania amazonensis* (Ueda-Nakamura et al., 2006; Matasyoh et al., 2007). Apesar de seus efeitos biológicos benéficos, foi constatado um potencial tóxico para essa espécie (PEREIRA et al., 2014). Desse modo, é de fundamental importância conhecer quais constituintes químicos da planta estão relacionados a essa toxicidade. Nesse sentido, o presente trabalho buscar avaliar se Terpinoleno, Sabineno (Tatsadjieu et al., 2008) e Umbelulone (Kpadonou-Kpoviessi et al., 2014), moléculas presentes nos óleos essenciais dessa espécie, estão associadas aos efeitos tóxicos relatados. **Objetivo:** avaliar a toxicidade de moléculas isoladas de *Ocimum gratissimum* L. *in silico* **Método:** As moléculas 4-isopropilideno-1-metilciclo-hexeno (terpinoleno), 4-metilideno-1-(propan-2-il) biciclo [3.1.0] hexano (sabineno) e (1R, 5S) -4-metil-1-propan-2-ilbiciclo (3.1.0) hex-3-en-2-ona (umbelulone), 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 predição das propriedades toxicológicas. **Resultados:** Frente a predição para a mutagenicidade todas moléculas se revelaram mutagênicas, foram realizadas predições para diferentes cepas de [*Salmonella typhimurium*](#): TA100_10RLI, TA1535_10RLI, TA1535_NA, TA100_NA, onde umbelulone se mostrou mutagênica frente as cepas: TA100_10RLI, TA1535_10RLI, TA1535_NA, o sabineno : TA100_10RLI, TA1535_10RLI, TA1535_NA e terpinoleno somente para a cepa: TA1535_10RLI. Assim como para a mutagenicidade, sabineno e o terpinoleno se apresentaram com potencial carcinogênico. Além disso, as três substâncias não apresentam predição a toxicidade para crustáceos (*Daphnia*), algas e peixes (Medaka). Também foram determinados os valores de DL₅₀ da umbelulone, sabineno e terpinoleno para a toxicidade aguda oral, sendo 2.478 kg/mol, 2.319 kg/mol, 1.951 kg/mol, respectivamente. **Considerações finais:** com dados aqui apresentados sugere-se que a umbelulone, sabineno e o terpinoleno possuem toxicidade e podem estar relacionadas a toxicidade relatada para a planta, uma vez que se apresentarem mutagênicas e carcinogênicas, contudo são necessários mais estudos *in vitro* ou *in vivo* para melhor caracterizar as propriedades tóxicas dessas substâncias e estabelecer critérios de uso seguro para o vegetal.

Palavras-chave: *in silico*; *Ocimum gratissimum*; 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.