



ANÁLISE IN SILICO DA TOXICIDADE DE COMPOSTOS MAJORITÁRIOS DO ÓLEO ESSENCIAL DE SYZYGIUM AROMATICUM

III Congresso Nacional de Biotecnologia, Educação e Inovações Tecnológicas, 1ª edição, de 23/09/2025 a 25/09/2025
ISBN dos Anais: 978-65-5465-163-9

OLIVEIRA; Leonardo Ferreira ¹, TAVARES; Agueda Maria de França ², MATOS; Alessandro Soares Fonseca de ³, BOTELHO; Cinthya Gomes ⁴

RESUMO

Os óleos essenciais, extratos vegetais altamente concentrados, são amplamente utilizados em aromaterapia e práticas integrativas devido às suas propriedades antissépticas, analgésicas, ansiolíticas e expectorantes. A alta concentração de compostos bioativos confere não apenas benefícios, mas também expressiva toxicidade, com possibilidade de envenenamento, irritação cutânea, reações alérgicas e interações medicamentosas. O óleo de cravo-da-índia (*Syzygium aromaticum*), exemplifica essa dualidade: embora possua reconhecidas propriedades analgésicas e antissépticas, sua citotoxicidade exige adequada diluição para evitar danos teciduais. Ferramentas de bioinformática, como o PROTOX-III, emergem como aliadas na avaliação de segurança, permitindo a predição computacional de toxicidades através da análise molecular de compostos. Dessa forma, embora representem valiosos recursos terapêuticos, os óleos essenciais demandam uso criterioso e respaldo científico para garantir sua eficácia e segurança. Analisar a toxicidade dos compostos do óleo de cravo-da-índia por meio de ferramentas de bioinformática. Foram analisados os perfis cromatográficos dos óleos essenciais de *S. aromaticum*, obtidos a partir de botões florais e folhas. As estruturas químicas correspondentes, no formato SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System), foram recuperadas do banco de dados PubChem. A predição da toxicidade dos compostos majoritários foi realizada por meio do servidor ProTox 3.0. O eugenol destacou-se como composto majoritário representando 85% tanto nos óleos obtidos a partir de botões florais como de folhas. Com base na análise do ProTox-3.0, o eugenol foi classificado na Classe de Toxicidade 4 (nocivo), com uma dose letal média (LD50) prevista de 1930 mg/kg. Os resultados indicam neurotoxicidade com probabilidade moderada (51%) e capacidade de atravessar a barreira hematoencefálica (77% de probabilidade). No entanto, não foram detectados riscos significativos de carcinogenicidade, mutagenicidade, imunotoxicidade ou toxicidade orgânica direta (hepática, renal, cardíaca ou respiratória). Metabolicamente, o eugenol mostrou potencial para interagir com enzimas do citocromo P450 (CYP2C9 e CYP2C19), indicando possível interferência no metabolismo de fármacos. Não foram observadas atividades relevantes em receptores nucleares (como estrogênio ou andrógeno) ou vias de estresse celular. Os dados sugerem que o principal risco toxicológico está associado a efeitos neurotóxicos e a interações medicamentosas, reforçando a necessidade de uso diluído e cautelar. A análise *in silico* evidenciou que o eugenol apresenta toxicidade moderada (Classe 4), com risco de neurotoxicidade e interações medicamentosas,

¹ UFMG, leolffo@gmail.com

² UFMG, aguedafr2@gmail.com

³ UFMG, alessandro.sfm@gmail.com

⁴ UFMG, cinthyago@ufmg.br

reforçando a relevância de abordagens computacionais para prever a segurança no uso de óleos essenciais.

PALAVRAS-CHAVE: Eugenol, Bioinformática, P450, Neurotoxicidade