

Evaluación del metabolismo y toxicidad de (E)- β -ocimeno componente principal de plaguicidas a base de *Tagetes* spp.

Moreno, Enzo^{1*}, Gayozo, Elvio²

*nexo.benitez11@gmail.com

¹ Universidad Nacional de Asunción, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Departamento de Biotecnología, San Lorenzo, Paraguay.

² Universidad Nacional de Asunción, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Departamento de Biología, San Lorenzo, Paraguay.

INTRODUCCIÓN

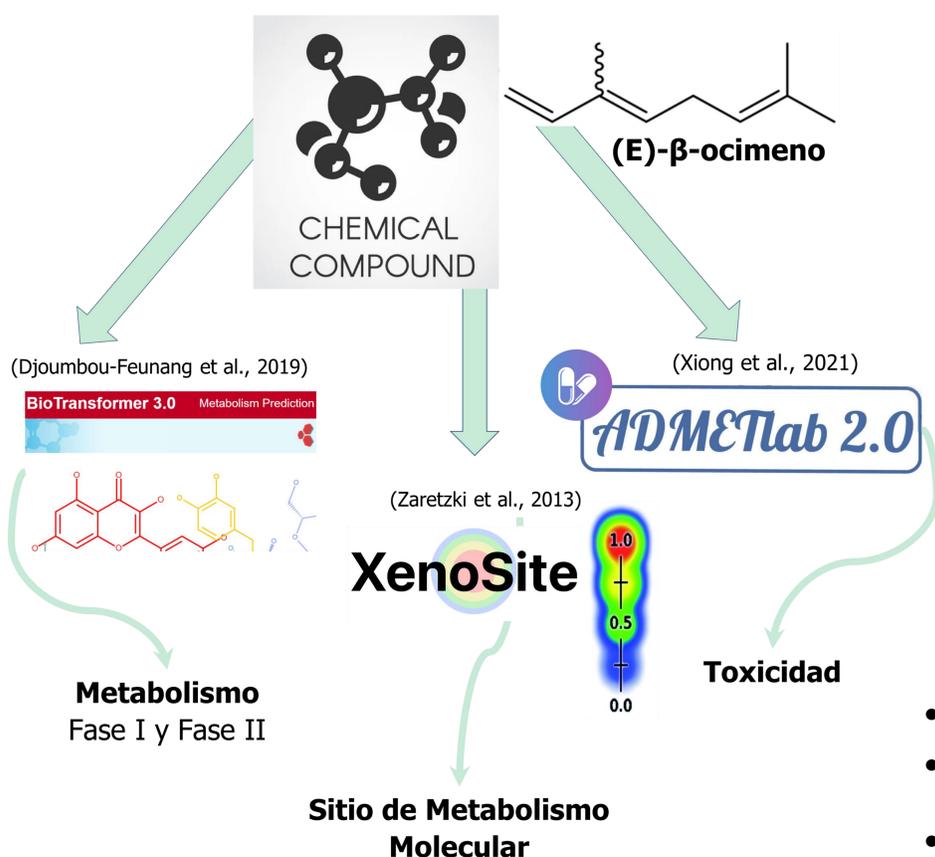
La *Tagetes* spp. (marigold) es una planta originaria de América, y actualmente también se cultiva en muchos países, generalmente son utilizadas con fines ornamentales y estudiadas por sus propiedades medicinales, además de esto, presenta propiedades bactericidas, fungicidas, nematocidas, acaricidas, incluso insecticidas contra varias especies de insectos de importancia para la agricultura, por lo que son empleados como componente en bioplaguicidas, sin embargo, se desconoce la toxicidad y el metabolismo de sus fitoconstituyente una vez ingresado en el organismo (Cruz et al, 2021).

(E)- β -ocimeno es el compuesto principal de los bioplaguicidas producidos a base de *Tagetes* spp., este compuesto desempeña un rol importante como metabolito, además de ser un producto natural encontrado en *Tagetes patula* y otras especies vegetales (NCBI, 2023). Para ello se analizó la biotransformación del (E)- β -ocimeno mediante el metabolismo de fase I y fase II, también se evaluaron los posibles sitios de metabolismo a nivel molecular de los metabolitos, así también se determinaron los eventos toxicológicos posibles mediante QSAR.

OBJETIVO

Evaluar el metabolismo y la toxicidad del compuesto (E)- β -ocimeno y sus metabolitos mediante métodos computacionales predictivos.

MATERIALES Y MÉTODOS



RESULTADOS

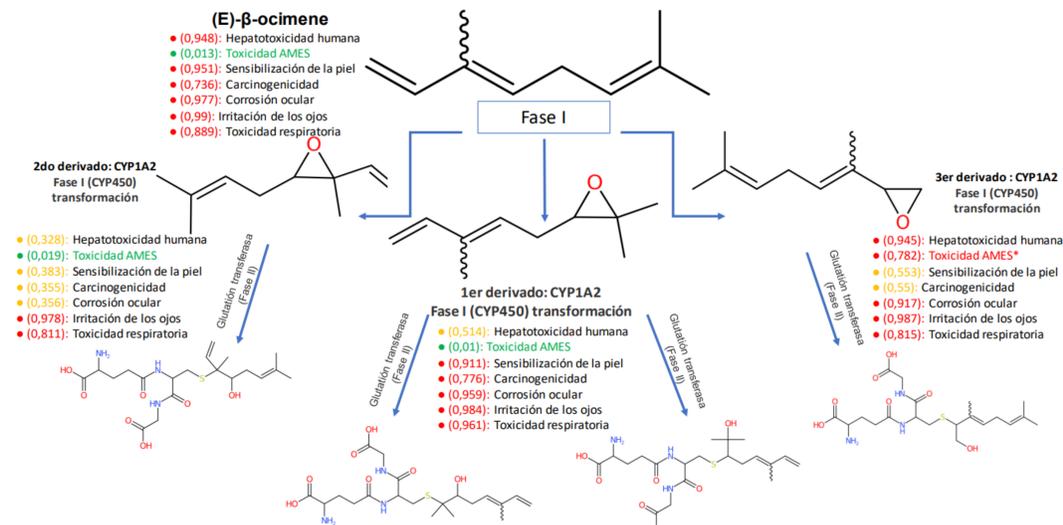


Figura 1: Metabolismo de Fase I del (E)- β -ocimeno.

En la fase I, se mantiene como principal efecto tóxico la irritación ocular y se observa una disminución en la hepatotoxicidad, con moderada toxicidad.

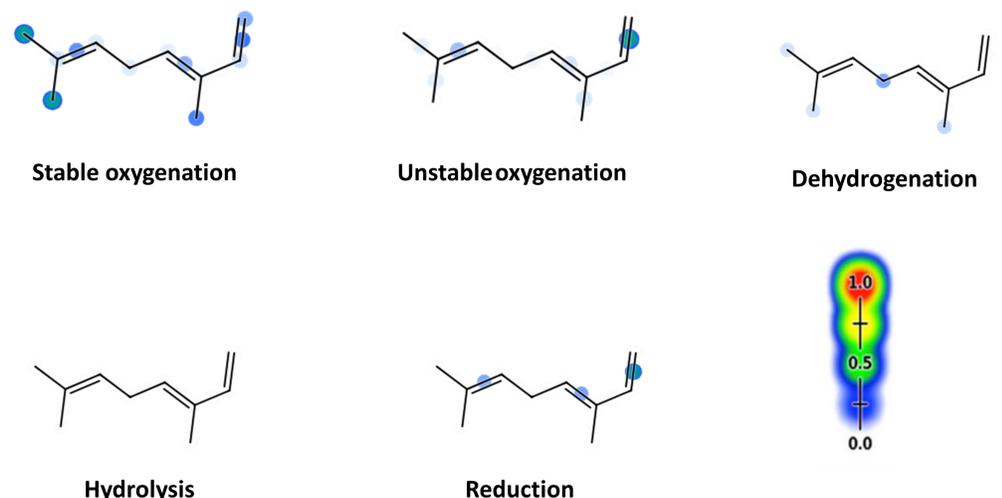


Figura 2: Sitio de metabolismo del (E)- β -ocimeno.

CONCLUSIÓN

Los resultados demuestran principalmente actividades tóxicas en la absorción como irritación ocular y toxicidad respiratoria, junto con actividades hepatotóxicas y carcinogénicas. También se ha registrado que la molécula de (E)- β -ocimeno no sufre biotransformación de metabolismo de Fase II.

REFERENCIAS

- Cruz Flores, O., Espinoza Ruiz, M., Santiesteban Hernández, A., & Cruz-López, L. (2021). Caracterización química de los volátiles de tagetes nelsonii. Polibotánica, 0(51).
- Djombou-Feunang, Y., Fiamoncini, J., Gil-de-la-Fuente, A., Greiner, R., Manach, C., & Wishart, D. S. (2019). BioTransformer: a comprehensive computational tool for small molecule metabolism prediction and metabolite identification. Journal of cheminformatics, 11(1), 1-25.
- National Center for Biotechnology Information (2023). PubChem Compound Summary for CID 5281553, beta-Ocimene. Retrieved June 14, 2023 from <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/beta-Ocimene>.
- Zaretski, J., Matlock, M., & Swamidass, S. J. (2013). XenoSite: accurately predicting CYP-mediated sites of metabolism with neural networks. Journal of chemical information and modeling, 53(12), 3373-3383.
- Xiong, G., Wu, Z., Yi, J., Fu, L., Yang, Z., Hsieh, C., ... & Cao, D. (2021). ADMETlab 2.0: an integrated online platform for accurate and comprehensive predictions of ADMET properties. Nucleic Acids Research, 49(W1), W5-W14.