

Evaluación *in silico* de la biotransformación y toxicología de Azadiractina compuesto mayoritario de bioinsecticidas a base de Neem (*Azadirachta indica*)

Gayozo, Elvio^{1*} & Rojas, Laura²

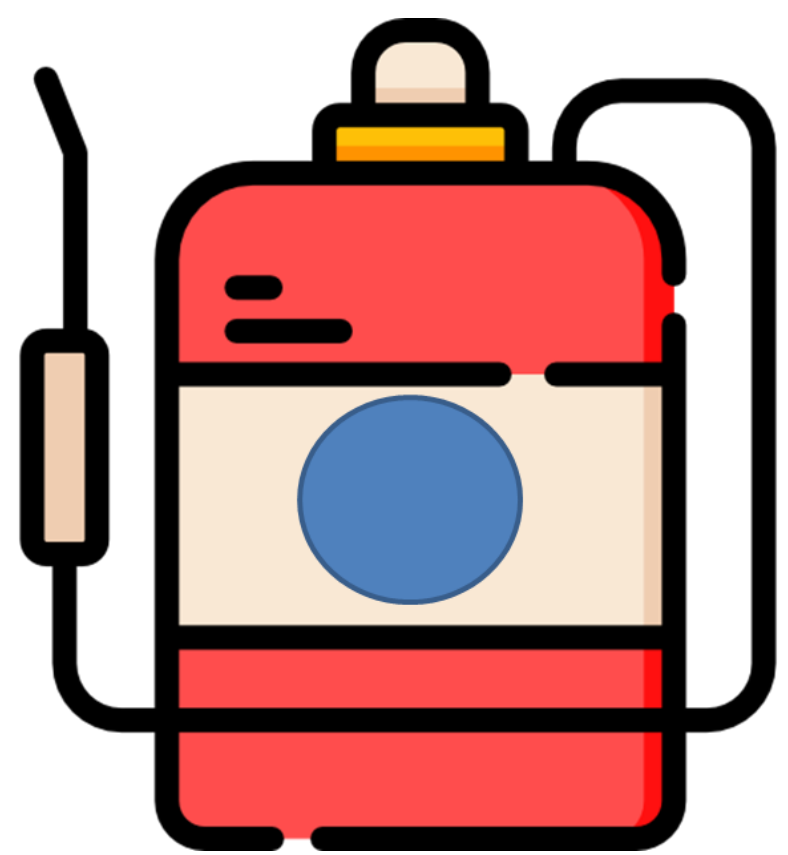
*elviologo@gmail.com

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

²Universidad Nacional de Asunción, Facultad de Ciencias Químicas, Departamento de Microbiología Industrial, San Lorenzo, Paraguay.

INTRODUCCIÓN

Las prácticas en la agricultura moderna se inclinan al uso de compuestos con menor toxicidad, y que no represente un peligro para el ambiente.



Bioplaguicidas a base de productos naturales



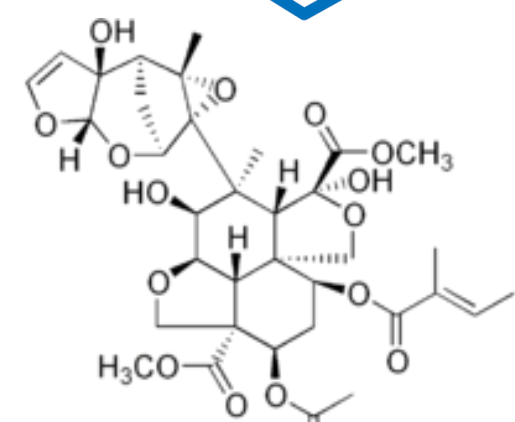
(Nava-Pérez et al., 2012; Martínez y Gómez, 2007).

OBJETIVO

Evaluar la biotransformación de la Azadiractina, componente principal de bioplaguicidas a base de Neem, así como la toxicidad del compuesto y de sus metabolitos, mediante métodos QSAR (relación cuantitativa estructura-actividad).

METODOLOGÍA

PubChem



BioTransformer 3.0

(Djoumbou-Feunang et al., 2019)



ADMETlab 2.0

(Xiong et al., 2021)

Metabolismo
Fase I
Fase II

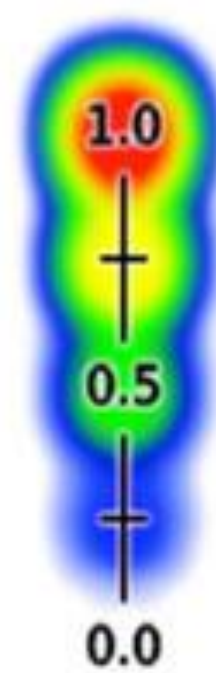
Toxicidad



XenoSite

(Zaretski et al., 2013)

Sitio de
Metabolismo
Molecular



REFERENCIAS

Nava-Pérez, E., García-Gutiérrez, C., Camacho-Báez, J. R., & Vázquez-Montoya, E. L. (2012). Bioplaguicidas: una opción para el control biológico de plagas. *Ra Ximhai*, 8(3), 17-29.
Martínez, V. C., & Gómez, A. S. (2007). Riesgo genotóxico por exposición a plaguicidas en trabajadores agrícolas. *Rev. Int. Contam. Ambient.* 23 (4) 185-200.
Djoumbou-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.
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.
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.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

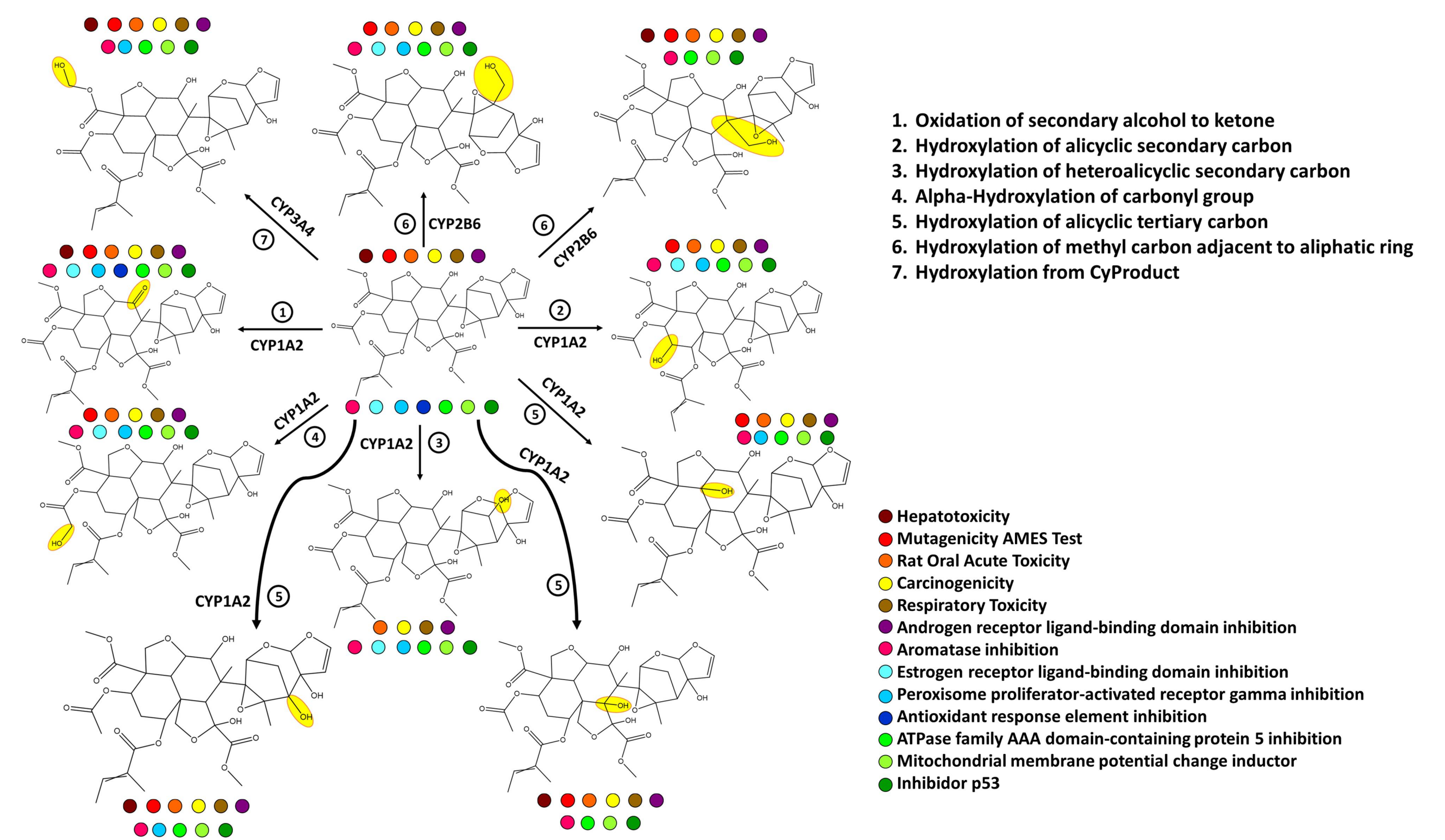


Figura 1: Metabolismo de Fase I de la Azadiractina.

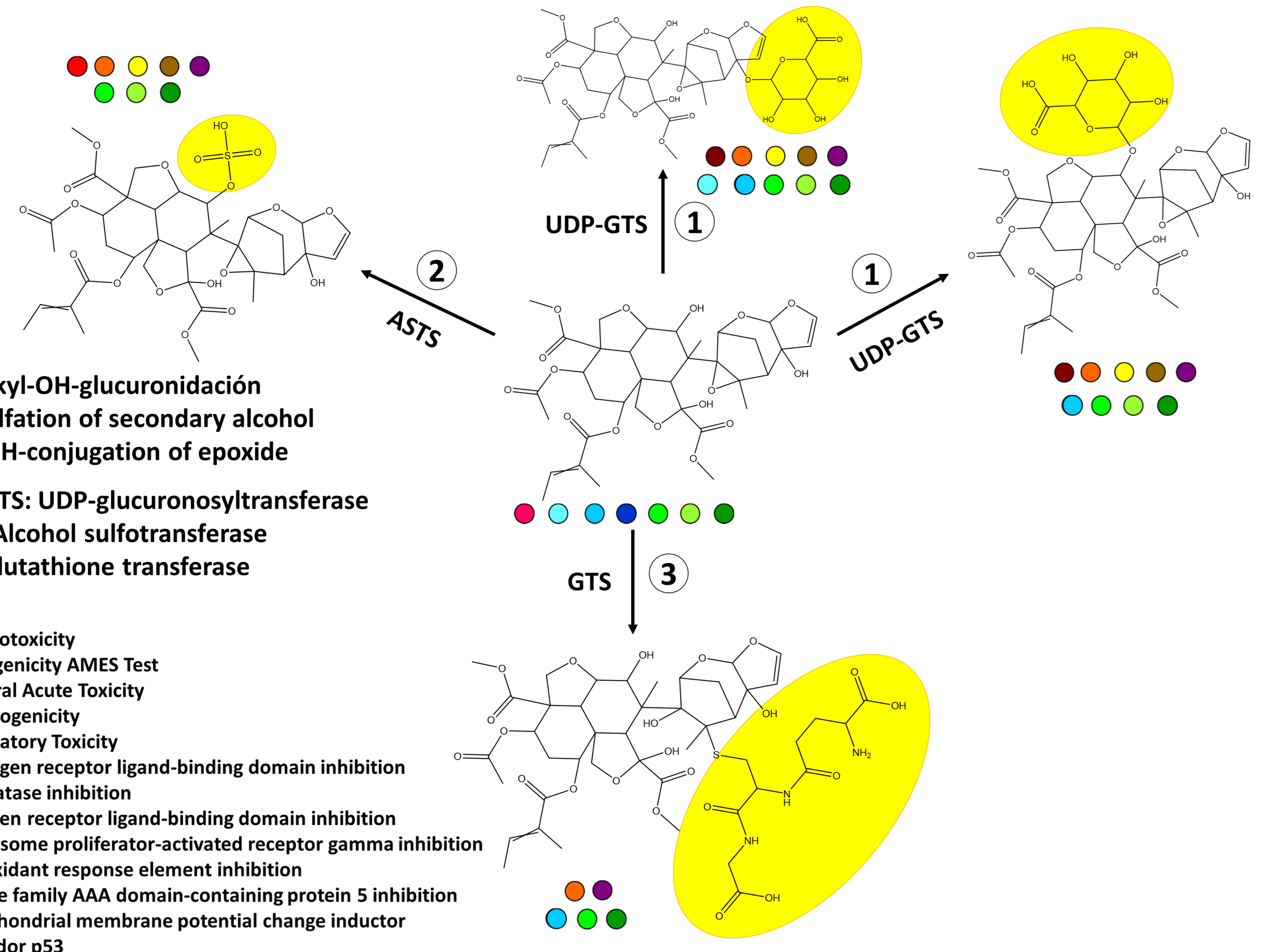


Figura 2: Metabolismo de Fase II de la Azadiractina.

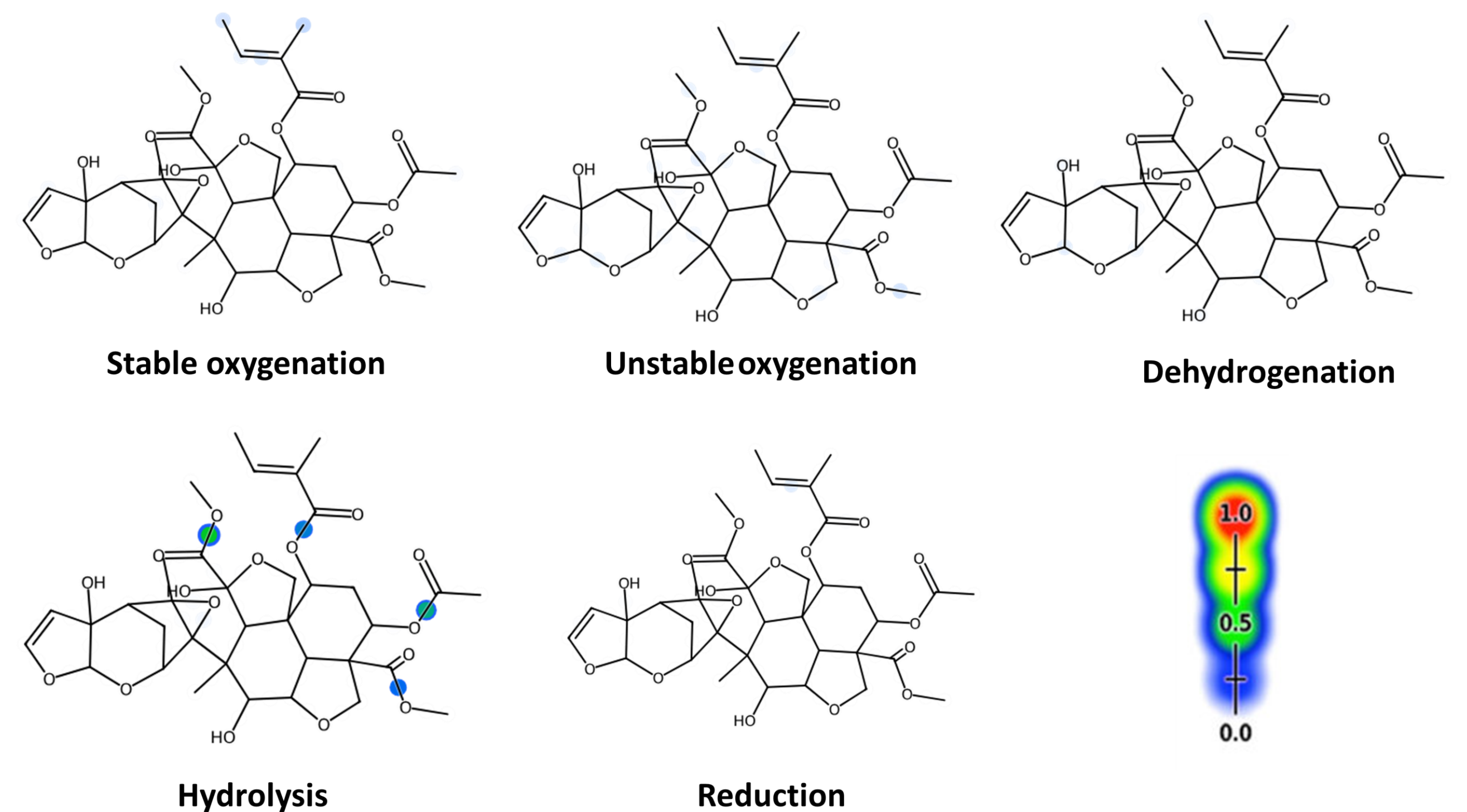


Figura 3: Sitio de metabolismo de la molécula de la Azadiractina.

CONCLUSIÓN

Los resultados demuestran que la Azadiractina y metabolitos presentan actividades hepatotóxicas, toxicidad oral y respiratoria, así como también actividades tóxicas que podría afectar las vías de recepción de señales nucleares y vías de respuestas al estrés celular. Las reacciones metabólicas con mayor probabilidad fueron oxidación y la hidroxilación de carbonos en el compuesto.