

Análisis computacional de la biotransformación y toxicidad del Citronelol y sus metabolitos, componente principal de la Citronela

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

El principio activo Citronelol es el compuesto principal de la Citronela, un conocido repelente natural de insectos.



Repelente a base de productos naturales.

(Wany et al., 2013)

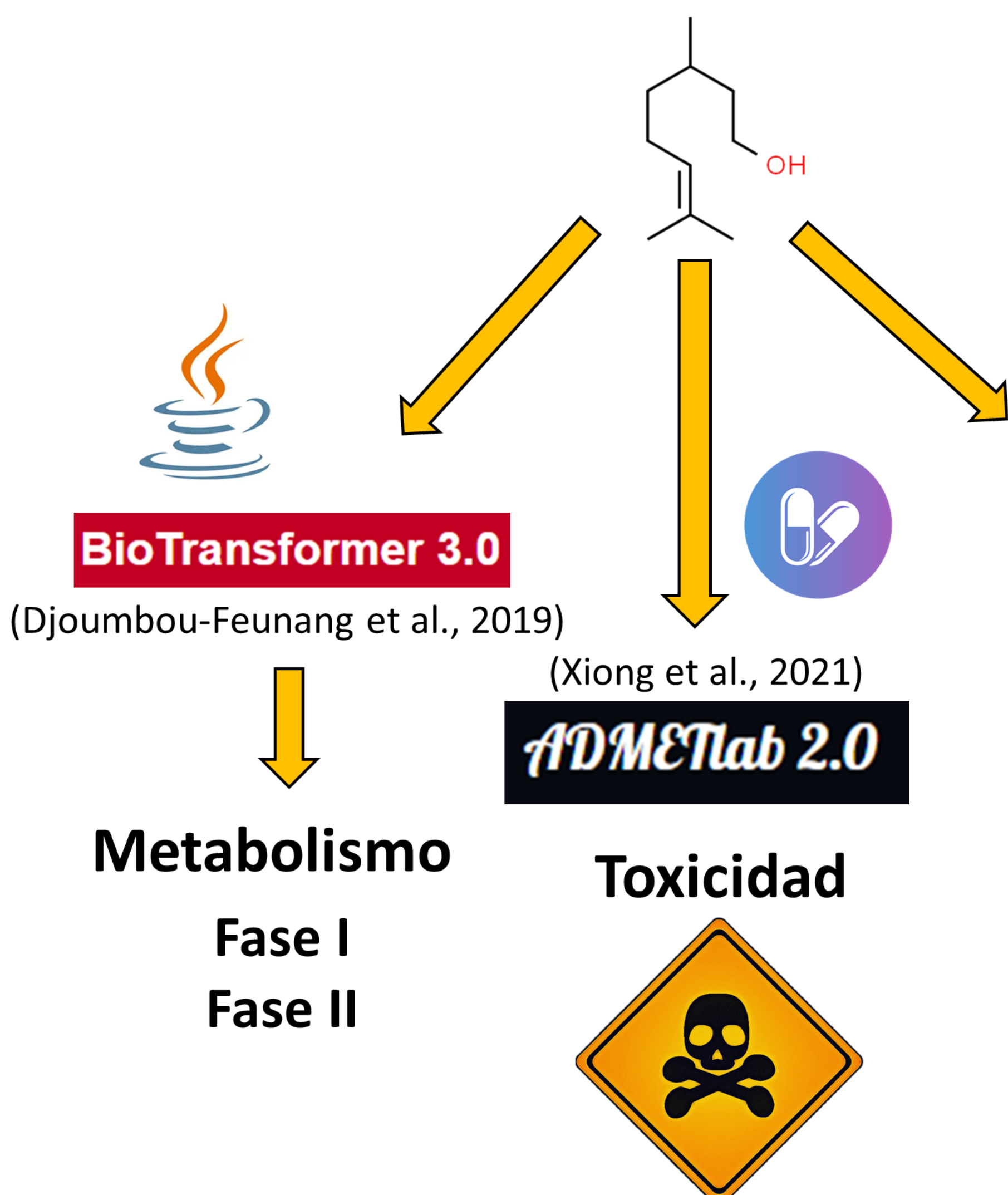


OBJETIVO

Analizar la biotransformación del Citronelol y evaluar la posible toxicidad del compuesto y así como de los metabolitos productos del metabolismo de fase I y fase II, mediante métodos QSAR (relación cuantitativa estructura-actividad).

METODOLOGÍA

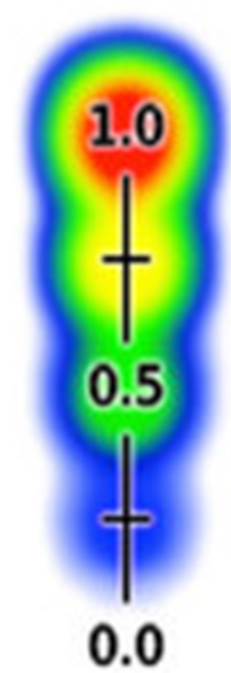
PubChem



XenoSite

(Zaretski et al., 2013)

Sitio de
Metabolismo
Molecular



REFERENCIAS

- Wany, A., Jha, S., Nigam, V. K., & Pandey, D. M. (2013). Chemical analysis and therapeutic uses of citronella oil from *Cymbopogon winterianus*: A short review. *International Journal of Advanced Research*, 1(6), 504-521.
- 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

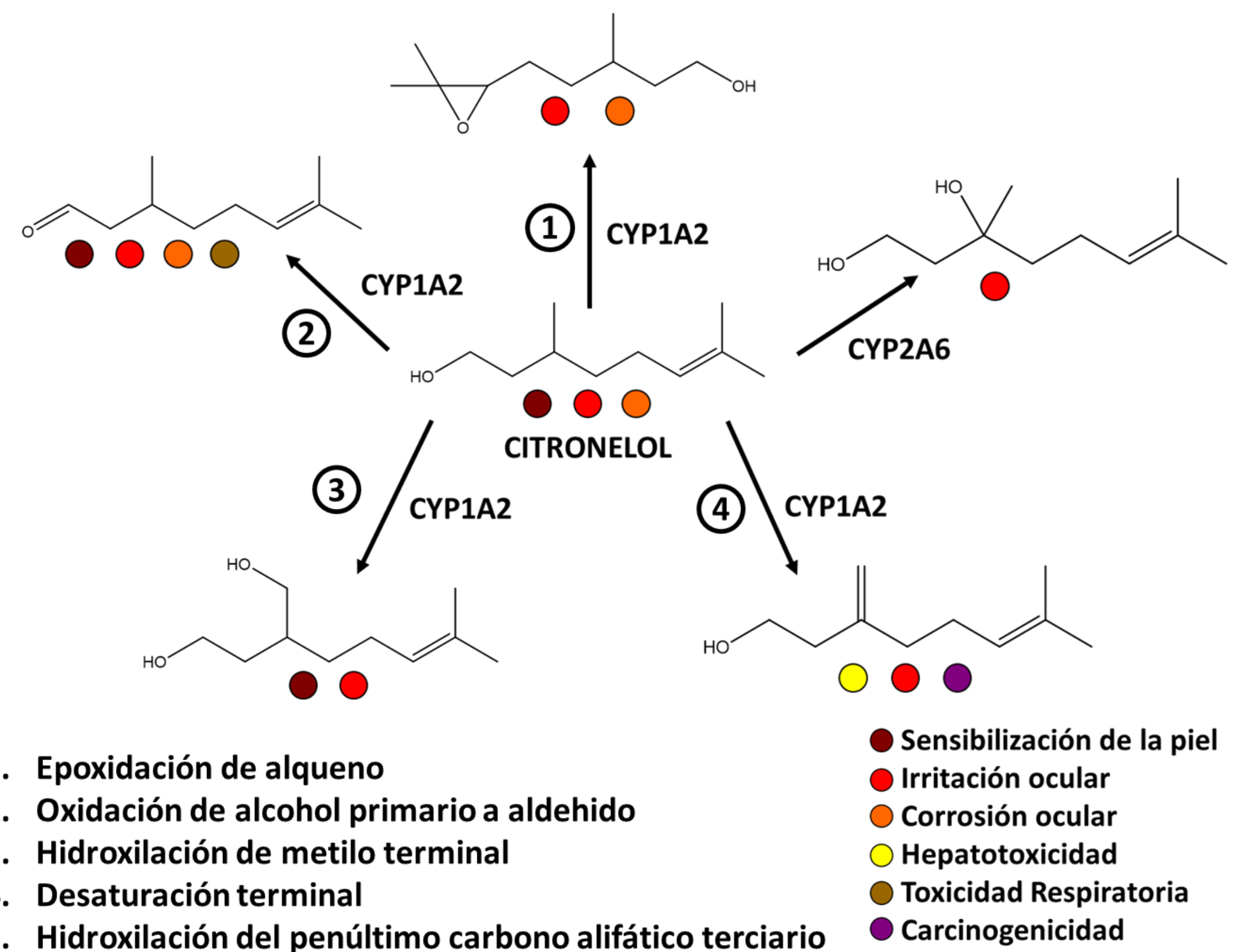


Figura 1: Metabolismo de Fase I del Citronelol.

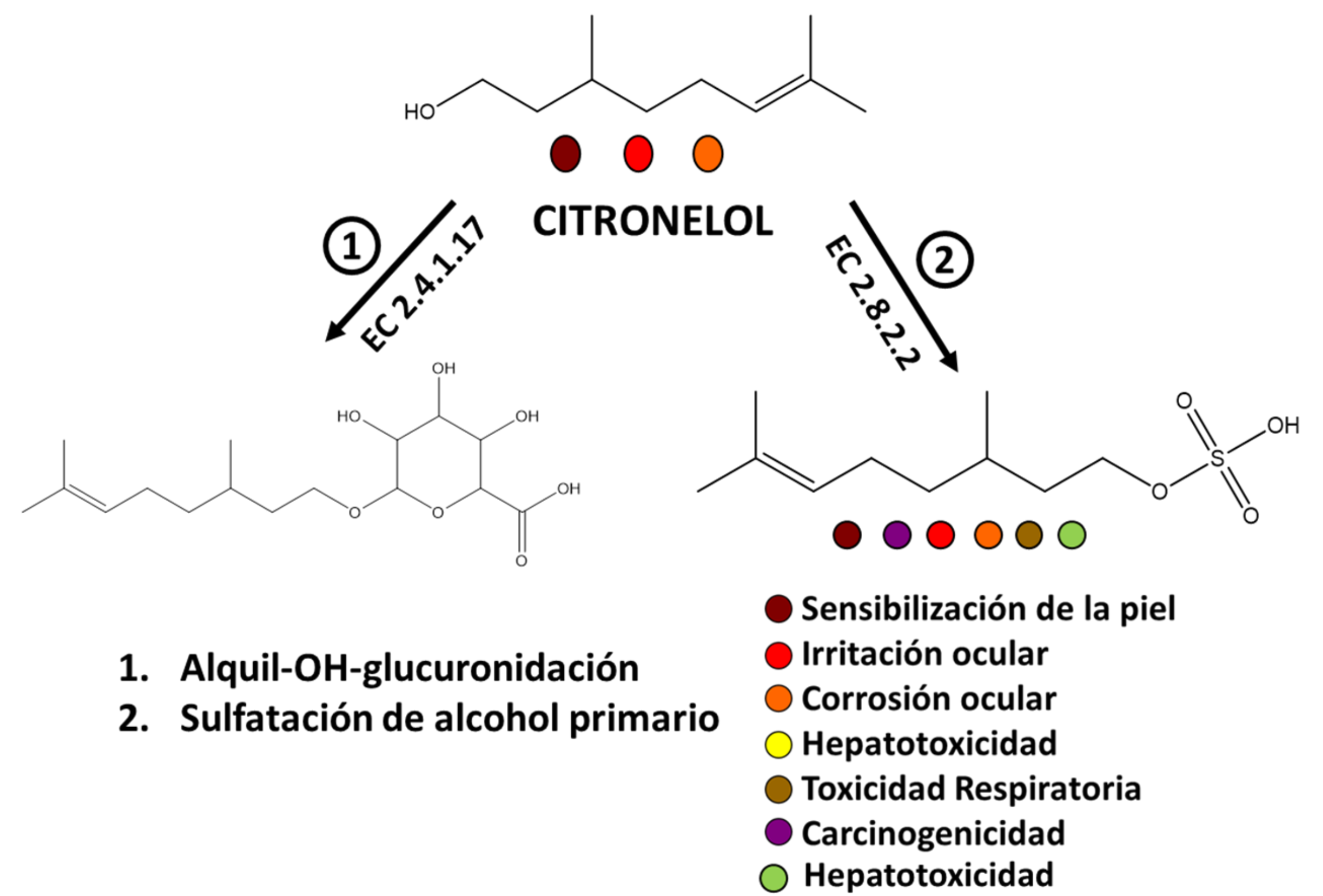


Figura 2: Metabolismo de Fase II del Citronelol.

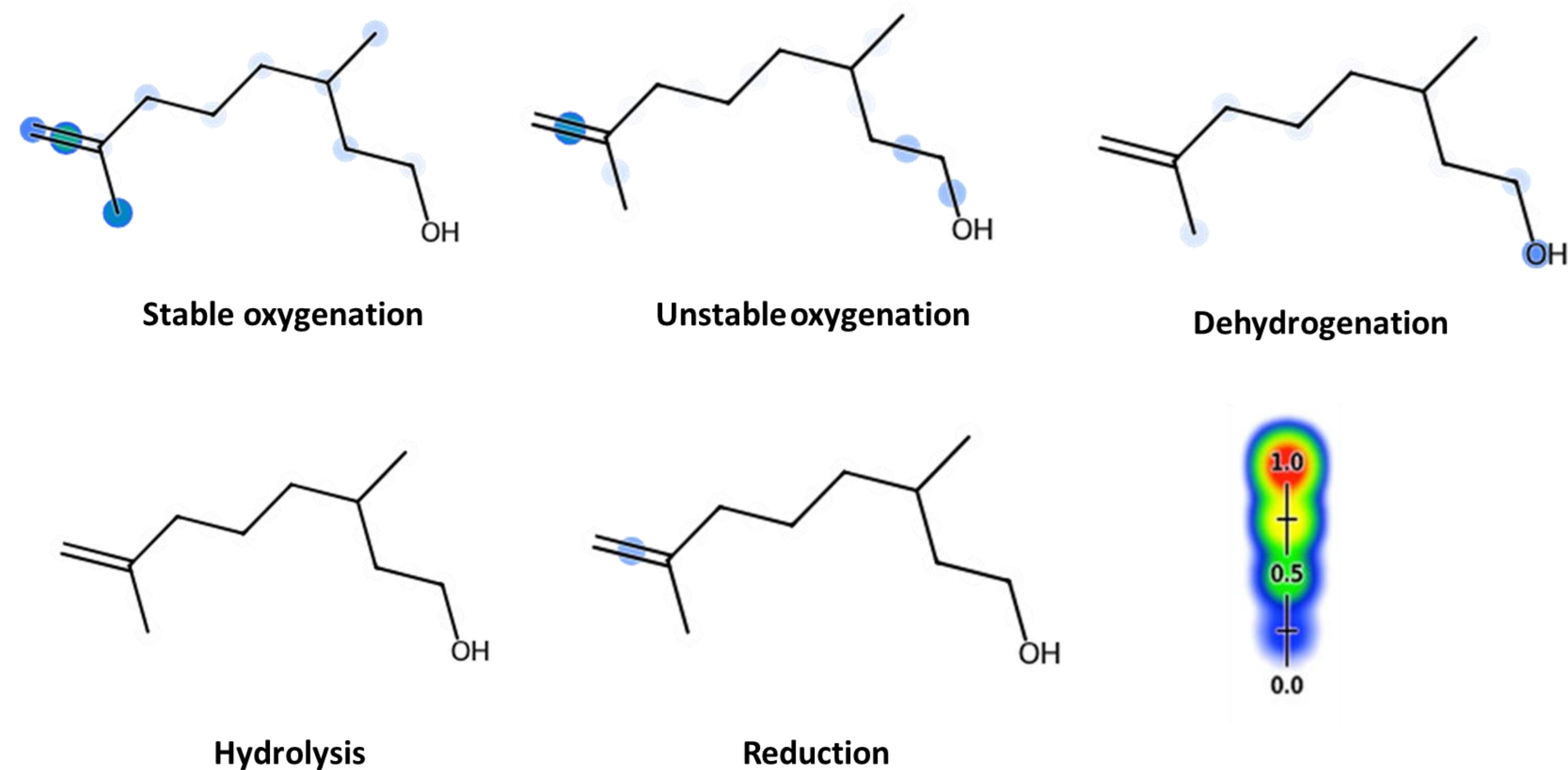


Figura 3: Sitio de metabolismo de la molécula del Citronelol.

CONCLUSIÓN

Los hallazgos generados en este estudio revelan los posibles metabolitos del Citronelol generados en el organismo animal debido a una posible absorción mediante el metabolismo de fase I y fase II, también evidencia la disminución de la toxicidad en algunos metabolitos, sin embargo, en otros se observa un aumento de la toxicidad en menor grado, como en el caso del metabolismo de fase II.