

RAI MK, ACHARYA D. Screening of some asteraceous plants for antimycotic activity. *Compositae Newsletter*, Stockholm, 1999, 34: 37-43
TONUCI, L. R. et al. In vitro schistosomicidal effects of the essential oil of *Tagetes erecta*. *Revista Brasileira de Farmacognosia*, v. 22, n. 1, p. 88-93, 2012

Keywords: *Tagetes erecta*, essential oil, leaves.

FA31 - PREPARO E CARACTERIZAÇÃO DO COMPLEXO DE INCLUSÃO DO ÓLEO ESSENCIAL DE *Croton zehntneri* Pax et Hoffm. COM β -CD POR COPRECIPITAÇÃO

SILVA, R.M.1*, MOURA, L.C.B.1, AGUIAR, U.N.2, ROCHA, M.S.3, DE LIMA, S.G.1,2 1Departamento de Química - UFPI, 2Pós-graduação em Ciências Farmacêutica - UFPI, 3Núcleo de Tecnologia Farmacêutica - UFPI, *raiane.q1@gmail.com

Introdução

Croton zehntneri Pax et Hoffm., conhecida popularmente como canelinha, é uma espécie aromática do Nordeste brasileiro, usada na medicina popular como sedativo, estimulante de apetite e no alívio dos distúrbios intestinais (COSTA et al., 2008). O óleo essencial de *C. zehntneri* (OECZ) possui como principal constituinte o estragol (COSTA et al. 2008). Sua estabilidade térmica e solubilidade aquosa podem ser melhoradas com a utilização das ciclodextrinas (CD).

Objetivos

O objetivo deste trabalho foi preparar o complexo de inclusão do OECZ com β -CD e sua caracterização por espectroscopia de absorção no infravermelho (FTIR-ATR) e por calorimetria exploratória diferencial (DSC).

Procedimento Experimental

O material vegetal (folhas) foi coletado do município de Simões - PI, a exsiccata foi depositada no Herbário da UFPI. O óleo essencial das folhas frescas (cerca de 250g) foi obtido por hidrodestilação, utilizando aparelho tipo Clevenger®, por um período de três horas. O OECZ foi analisado por CG-EM (Shimadzu GC-17A/MS QP5050A), EI, 70 eV (MEDEIROS, et al., 2012). O CI foi preparado de acordo com o método de coprecipitação descrito por Bhandari et al. (1998). Os espectros foram obtidos na região do infravermelho, utilizando acessório para Reflectância Total Atenuada. As curvas de DSC foram obtidas em atmosfera de nitrogênio, na faixa de temperatura de 30 a 300 °C.

Resultados e Discussão

A análise por CG-EM permitiu a identificação de 100% dos constituintes integrados. Os principais componentes identificados foram: eucaliptol (1,44 %), estragol (92%), espatulenol (5,57%), outros (1,0%). Por FTIR-ATR observa-se uma alteração na frequência de absorção das bandas características do OECZ e da β -CD quando comparamos com a sua mistura física e seu complexo de inclusão (Figura 1), sugerindo uma interação entre as duas moléculas (WANG et al., 2011). Analisando a curva DSC da β -CD (Figura 2) observa-se um acentuado pico endotérmico em 120 °C, provocado pela perda de água presente no interior de sua cavidade. Este pico está bastante reduzido na curva DSC do CI sugerindo a formação do complexo com o OECZ, observa-se ainda a redução da intensidade dos picos característicos do OECZ, sugerindo uma maior estabilidade do OECZ complexo quando comparado ao OECZ livre.

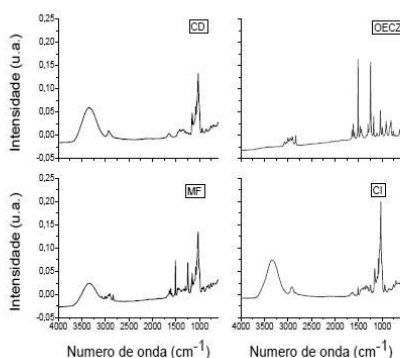


Figura 1: FTIR-ATR da β -CD, OECZ, MF e CI.

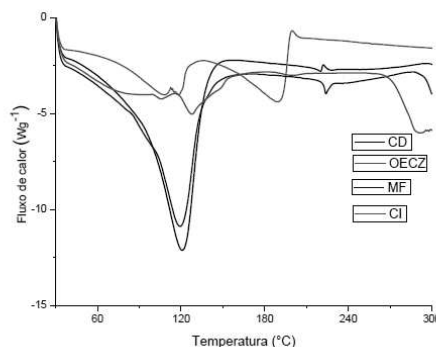


Figura 2: Curva DSC da β -CD, OECZ, MF e CI.

Conclusão

A análise por CG-EM do OECZ permitiu a identificação de 100% dos constituintes integrados, sendo o estragol seu constituinte majoritário (92%). Já as análises por FTIR-ATR e DSC nos permitem inferir que ocorreu a formação do complexo de inclusão.

Referências

- BHANDARI, B.R. et al. Lemon oil to β -cyclodextrin ratio effect on the inclusion efficiency of β - cyclodextrin and the retention of oil volatiles in the complex. **J. Agric. Food Chemistry**, v.46, p.1494-1499, 1998.
- COSTA, J.G.M. da et al. Composição química e avaliação da atividade antibacteriana e toxicidade do óleo essencial de *Croton zehntneri* (variedade estragol). **Rev. bras. farmacogn.** v.18, n.4, p.583- 586, 2008.
- MEDEIROS, L.B.P. et al. Chemical constituents and evaluation of cytotoxic and antifungal activity of *Lantana camara* essential oils. **Braz J of Pharmacog**, 22 (6): 1259-1267, Nov./Dec. 2012
- WANG, J. et al. Physicochemical and release characterisation of garlic oil- β -cyclodextrin inclusion complexes. **Food Chem.**, v. 127, p. 1680-1685, 2011.

Palavras-chaves: Canelinha; β -Ciclodextrina; Complexo de inclusão; *Croton zehntneri*.

Suporte Financeiro: UFPI, CNPq

FA 32 - *IN SILICO* PREDICTION OF NEW DRUGS TO CHEMOTHERAPY OF ANTIMONIAL RESISTANT *Leishmania* PARASITES

ROCHA, F.T.A.^{1,*}; ALMEIDA, V.P.A¹; RUIZ, J. C.²; BEVERLEY, S.M.³; MURTA, S.M.F.²; LIARTE, D.B.¹

1 - Federal University of Piauí, Teresina, Piauí, Brazil. * thyagoabreu@hotmail.com 2 - Laboratory of Cellular and Molecular Parasitology, René Rachou Research Center - FIOCRUZ, Belo Horizonte, Minas Gerais, Brazil. 3 - Washington University in Saint Louis, USA.

Introduction

The classical treatment of leishmaniasis requires the administration of toxic drugs and poorly tolerated. The pentavalent antimonials - meglumine antimoniate (Glucantime) and sodium stibogluconate (Pentostam) - are compounds used in first-line treatment of leishmaniasis, however, parasite resistance significantly reduces the efficacy of these conventional drugs (TIUMAN, et al. May 2011). Thus, new approaches are developed and implemented to supply that need, highlighting in this study the bioinformatic as essential in search for new therapeutic tools, comparable to the importance of ethnopharmacology (BERNARD et al., 2001).

Objective

This approach search encounters differentials drugs for treatment of Leishmaniasis starting from *in silico* prediction using different data from DNA microarrays from *Leishmania* spp. and database of drug targets and *Leishmania* proteome.

Methodology

Amino acid sequences from microarray studies and protein targets obtained from DrugBank 3.0 database were compared using BLAST algorithm. The microarray results were analyzed separately according to type of DNA sample (genomic - gDNA or transcriptomic - cDNA); *Leishmania* population, (Wild-type - WTS or antimonial resistant - SbR) and parasite specie (LIARTE & MURTA, 2010; LIARTE, 2010). Drug targets were classified according to its pharmacological nature. These data were compiled in a new local database and used for drug target prediction.

Results and Discussion

Was possible find drugs that interact exceptionally with molecular targets selective, products of transcription/translation related to drug resistance phenotype (up/down regulation of genes associated) in both assays from DNA microarrays in resistant variety (SBR) (. Among the drugs that interact with the molecular targets shown in Table 01, there are amino acids, primary metabolites, and many chemical compounds not employed with pharmacological purpose, being performed a selection of characterized drugs and applicable in therapy, highlighting 2 substances (1 single metabolites and 2 drugs) interact to proteins up or down regulated identified in both genomic and transcriptomic microarrays.