



CULTURA DE DUAS ESPÉCIES DE MANJERICÃO (*Ocimum basilicum* L. E *Ocimum minimum* L.) EM SISTEMA DE HIDROPONIA

Maria Amélia Gonçalves¹
Gabriela Lafayne Okonski Dos Santos²
Ágatha Milena Rebelato Corsino²
Regina Aparecida Correia Gonçalves³
Arildo José Braz de Oliveira³

¹ Acadêmico de Pós-Graduação em Ciências Farmacêutica, Universidade Estadual de Maringá. ² Acadêmico de Graduação em Farmácia, Universidade Estadual de Maringá. ³ Docente Departamento de Farmácia, Universidade Estadual de Maringá

Introdução: Plantas do tipo especiarias possuem grande influência na história do mundo, pois eram itens valiosos de troca e comércio como fontes monetárias. Dentre as ervas aromáticas estão o *Ocimum basilicum* L. e *Ocimum minimum* L. (Lamiaceae), mais conhecidas por manjeriço, são nativas da região asiática, mas já foram introduzidas mundialmente e no Brasil possuem importância econômica. O manjeriço apresenta propriedades antimicrobianas, antioxidantes, anti-inflamatória, citotóxica, as raízes são descritas com propriedades antimaláricas e antidiabéticas. O cultivo em hidroponia é uma técnica sem solo, onde as raízes ficam suspensas em meio líquido, recebendo os nutrientes necessários para o desenvolvimento da planta.

Objetivo: Estabelecer o cultivo de mudas de *Ocimum basilicum* L. e *Ocimum minimum* L. em um sistema hidropônico.

Materiais e métodos: O cultivo de manjeriço foi iniciado com 6 mudas de cada espécie adquiridas de viveiro local, as raízes foram lavadas em água

corrente e as mudas adaptadas ao sistema de hidroponia compacto caseiro do tipo técnica de filme nutrientes (NFT) contendo canais de cultivo onde passa a solução nutritiva de fertilizante mineral a base de NPK e nitrato de cálcio, esse sistema foi montado no Laboratório de Biotecnologia de Produtos Naturais e Sintéticos do Departamento de Farmácia da Universidade Estadual de Maringá.

Resultados: As duas espécies se adaptaram e se desenvolveram bem no sistema de hidroponia, com um crescimento de comparação entre 6 meses, iniciando de 12,5 cm, alcançando 75 cm após esse período, com uma taxa de crescimento de 6 vezes.

Conclusão: Concluímos que as espécies de manjeriço cultivadas em hidroponia conseguiram se adaptar rapidamente ao sistema de cultivo implementado, abrindo a perspectiva de explorar seus compostos futuramente.

Palavras-chave: solução nutritiva; manjeriço; cultivo.





Referências

Bernhardt JC. Judas Maccabaeus. The Encyclopedia of Ancient History. 1. Ed. New York: Wiley-Blackwell, Malden, MA; 2012. 512 p.

Majdi C, Pereira C, Dias MI, Calhelha RC, Alves MJ, Rhourri-Frih B, Charrouf Z, Barros L, Amaral JS, Ferreira ICFR. Phytochemical characterization and bioactive properties of cinnamon basil (*Ocimum basilicum* CV. 'cinnamon') and Lemon Basil (*Ocimum × citriodorum*). Antioxidants (basel). Bragança: editor; 2020. 9:369.

Peter KV. Handbook of herbs and pices. 1. ed. Cambridge: Peter K. V; 2006. 336 p.

Pandey V, Swami RK, Narula A. Harnessing the Potential of Roots of Traditional Power Plant: *Ocimum*. front. Plant. Sci. 1. ed. Lausanne: Luigi Lucini; 2021. 19 p.

Reis NR, Shibatta OA, Peracchi AL, Pedro WA, Lima IP. Sobre os mamíferos do Brasil. In Mamíferos do Brasil. 2. ed. Londrina: Nelio R. dos Reis, Adriano L. Peracchi, Wagner A. Pedro e Isaac P. de Lima; 2011. 439 p.





CARACTERIZAÇÃO DO COMPLEXO DE INCLUSÃO DO ÓLEO ESSENCIAL DE CITRONELA COM BETA-CICLODEXTRINA

Juliana Harumi Miyoshi¹
Laira Machado Brandão Toller²
Giovanni Cesar Teles³
Thamara Thaiane da Silva Crozatti⁴;
Ana Claudia Nogueira Mulati⁵
Leandro Herculano da Silva⁶
Gislaine Franco de Moura Costa⁷
Graciette Matioli⁷

¹Acadêmico de Pós-Graduação (Doutorado) em Ciências Farmacêuticas, Universidade Estadual de Maringá, Maringá/PR. ²Acadêmico de Pós-Graduação (Mestrado) em Ciências Farmacêuticas, Universidade Estadual de Maringá, Maringá/PR. ³Acadêmico de Pós-Graduação (Mestrado) em Ciências de Alimentos, Universidade Estadual de Maringá, Maringá/PR. ⁴Doutora em Ciências de Alimentos, Universidade Estadual de Maringá, Maringá/PR. ⁵Docente – Universidade Federal do Paraná, Campus Avançado em Jandaia do Sul, Jandaia do Sul/PR. ⁶Docente – Departamento de Física, Universidade Tecnológica Federal do Paraná - Campus Medianeira, Medianeira/PR. ⁷Docente – Departamento de Farmácia, Universidade Estadual de Maringá, Maringá/PR

Introdução: O óleo essencial (OE) de citronela é conhecido pelo seu poder repelente, além de possuir atividades antimicrobianas, antioxidantes, entre outras. A utilização do OE é limitada devido sua baixa solubilidade e instabilidade. Sendo assim, o emprego de agentes complexantes, como a beta-ciclodextrina (beta-CD), é uma alternativa para melhorar suas características.

Objetivo: Caracterizar os complexos de inclusão (CI) preparados pelas metodologias de amassamento e co-precipitação do OE de citronela com a beta-CD por diferentes metodologias.

Material e métodos: A caracterização dos CI foi realizada por espectroscopia de infravermelho por transformada de Fourier acoplado com acessório de refletância atenuada (FTIR-ATR), Micro Raman, calorimetria diferencial de varredura (DSC) e termogravimetria (TGA).

Resultados: Nas análises realizadas no FTIR-ATR e no Micro Raman foram observados deslocamentos nos espectros dos CI e que não aparecem na mistura física, na qual caracterizam uma mudança no modo vibracional da molécula hóspede-hospedeiro, sugerindo que houve o processo de microencapsulação. No DSC, a beta-

CD apresentou três eventos endotérmicos. O primeiro característico da desidratação da beta-CD. O segundo e terceiro eventos estão relacionados ao processo de decomposição molecular e consequente remoção do material carbonáceo. Para ambos os CI, o pico característico da desidratação da beta-CD praticamente desapareceu, sugerindo que a molécula de água da cavidade da beta-CD foi substituída pelo OE. No TGA, a perda de massa na temperatura de 113 °C foi de 11,98% para a beta-CD e de 19,74% para a mistura física. Para os CI por amassamento e co-precipitação, a perda de massa foi de 6,63% e 4,51%, respectivamente. Corroborando com os resultados de DSC.

Conclusão: As técnicas de FTIR-ATR, Micro Raman, DSC e TGA se mostraram eficientes na evidência da formação dos CI entre a β -CD e o OE de orégano, tanto no amassamento quanto na co-precipitação.

Palavras-chave: microencapsulação; espectrofotometria; análises térmicas.

Financiador (es): Laboratório de Biotecnologia Enzimática, Central Analítica Multiusuário de Medianeira, CAPES, CNPq, Fundação Araucária e Finep.





Referencias

Santos PL, Araujo AAS, Quintans JSS, Oliveira MGB, Brito RG, Serafini MR, et al. Preparation, Characterization, and Pharmacological Activity of Cymbopogon winterianus Jowitt ex Bor (Poaceae) Leaf Essential Oil of β -Cyclodextrin Inclusion Complexes. Evidence-based Complement Altern Med; 2015.

Miyoshi JH, Castro JC, Fenelon VC, Garcia FP, Nakamura C V. Essential oil characterization of Ocimum basilicum and Syzygium aromaticum free and complexed with β - cyclodextrin . Determination of its antioxidant , antimicrobial , and antitumoral activities. J Incl Phenom Macrocycl Chem [Internet]. 2022; 102(1):117–32. Available from: <https://doi.org/10.1007/s10847-021-01107-0>.

Li W, Lu B, Sheng A, Yang F, Wang Z. Spectroscopic and theoretical study on inclusion complexation of beta-cyclodextrin with permethrin. J Mol Struct [Internet]. 2010; 981(1–3):194–203. Available from: <http://dx.doi.org/10.1016/j.molstruc.2010.08.008>.

Baranska M, Schulz H, Walter A, Rösch P, Quilitzsch R, Lösing G, et al. Investigation of eucalyptus essential oil by using vibrational spectroscopy methods. Vib Spectrosc. 2006; 42(2):341–5.





AVALIAÇÃO DA VIABILIDADE DE PRODUÇÃO DE FRUTANOS EM PLANTAS DE *Stevia Rebaudiana* CULTIVADAS EM SISTEMA HIDROPÔNICO

Gabriela Lafayne Okonski Dos Santos¹
Hevelyn Regina da Silva Lima²
Maria Amélia Gonçalves³
Aline Savam³
Regina Aparecida Correia Gonçalves⁴
Arildo José Braz de Oliveira⁴

¹Acadêmico de Graduação em Farmácia, Universidade Estadual de Maringá, Maringá/PR. ²Acadêmico de Pós-Graduação em Biotecnologia ambiental, Universidade Estadual de Maringá. ³Acadêmico de Pós-Graduação em Ciências Farmacêutica, Universidade Estadual de Maringá
⁴Docente Departamento de Farmácia, Universidade Estadual de Maringá

Introdução: A *Stevia rebaudiana* (Bertoni) Bertoni é uma planta da família Asteraceae, que ficou conhecida devido aos glicosídeos de steviol, um adoçante não calórico natural obtido a partir de suas folhas. Em suas raízes encontramos frutanos como a inulina, molécula prebiótica, utilizada na indústria alimentícia e farmacêutica. A parte menos utilizada da *Stevia* é suas raízes que normalmente são cultivadas no solo. O cultivo em hidroponia é uma técnica de cultivo sem solo, onde as raízes ficam suspensas em meio líquido, recebendo os nutrientes necessários para o desenvolvimento da planta.

Objetivo: Estabelecer o cultivo de mudas de *Stevia* por um sistema hidropônico, para a extração de frutanos a partir de suas raízes.

Materiais e métodos: As mudas de *Stevia* foram adquiridas de comércio local, foram lavadas e inseridas no sistema hidropônico caseiro do tipo técnica do fluxo laminar de nutrientes (NFT) contendo canais de cultivo onde passa a solução nutritiva de fertilizante mineral a base de NPK e nitrato de cálcio. Após 28 dias as raízes foram submetidas a extração aquosa e os extratos

foram analisados íntegros e por hidrólise em estufa à 80° C por 30 min, por cromatografia líquida de alta eficiência (CLAE) para a determinação da sua composição monossacarídica. A análise foi realizada no complexo central de apoio à pesquisa (COMCAP-UEM), empregando um CLAE com detector de índice de refração (SIGMA-ALDRICH, 2019). A eluição foi no modo isocrático usando como fase móvel acetonitrila (grau HPLC) e água (Milli-q) na proporção 75:25 (v/v) e as amostras concentradas em 20 mg/mL foram solubilizadas em acetonitrila e água na proporção 50:50 (v/v).

Resultados: Os resultados obtidos para as amostras foram comparados com padrão de inulina submetido às mesmas condições de análise.

Conclusão: Concluímos que *S. rebaudiana* cultivadas em hidroponia teve capacidade de produzir insulina em suas raízes.

Palavras-chave: extração; inulina; solução nutritiva.

Financiador(es): Conselho nacional de desenvolvimento científico e tecnológico (CNPQ).





Referências

Madans S, Ahmad S, Silva GN, Kohli K, Kumar Y, Singh R, Garg M. Stevia rebaudiana (Bert.) Bertoni. Revista Brasileira de Produtos Naturais e Recursos. 2010; 1: 267-286.

Carabin IG, Flamm WG. Evaluation of safety of inulin and oligofructose as dietary fiber. RegulToxicolPharmacol.1999;30: 268-282.

Martinez HEP. O uso do cultivo hidropônico de plantas em pesquisa. 3. ed.Viçosa: UFV, 2002. 61 p.[4] Reis NR, Shibatta OA, Peracchi AL, Pedro WA, Lima IP. Sobre os mamíferos do Brasil. In Mamíferos do Brasil. 2. ed. Londrina: Nelio R. dos Reis, Adriano L. Peracchi, Wagner A. Pedro e Isaac P. de Lima; 2011. 439 p.





OBTENÇÃO DE PEPTÍDEOS BIOATIVOS COM POTENCIAL FUNCIONAL DO SUBPRODUTO DA SOJA E IDENTIFICAÇÃO POR LC-MS/MS

Laira Machado Brandão Toller¹
Thamara Thaiane da Silva Crozatti²
Juliana Harumi Miyoshi³
Giovanni Cesar Teles⁴
Sabrina Barbosa de Souza Ferreira⁵
Eduardo Cesar Meurer⁶
Graciette Matioli⁷

¹Acadêmica de Pós-Graduação (Mestrado) em Ciências Farmacêuticas, Universidade Estadual de Maringá, Maringá/PR. ²Acadêmica de Pós-Graduação (Doutorado) em Ciência de Alimentos, Universidade Estadual de Maringá, Maringá/PR. ³Acadêmica de Pós-Graduação (Doutorado) em Ciências Farmacêuticas, Universidade Estadual de Maringá, Maringá/PR. ⁴Acadêmica de Pós-Graduação (Mestrado) em Ciência de Alimentos, Universidade Estadual de Maringá, Maringá/PR. ⁵Docente – Departamento de Farmácia, Universidade Estadual de Maringá, Maringá-PR. ⁶Docente – Laboratório de Espectrometria de Massas, Universidade Federal do Paraná, Jandaia do Sul-PR. ⁷Docente – Departamento de Farmácia, Universidade Estadual de Maringá, Maringá-PR

Introdução: O uso de subprodutos, como o farelo de soja, se evidencia uma alternativa próspera para o desenvolvimento de alimentos ricos em peptídeos bioativos, que são cadeias curtas de aminoácidos com especial interesse devido sua alta bioatividade e propriedades funcionais. Tais compostos podem ser obtidos por processos de hidrólises enzimáticas utilizando proteases comerciais.

Objetivo: Aplicar protease comercial para obtenção de peptídeos bioativos e utilizar um sistema inovador para identificação dos di e tripeptídeos por meio de espectrometria de massa por cromatografia em fase líquida (LC-MS/MS).

Material e métodos: Foi aplicado hidrólise enzimática no farelo de soja com Protease Alcalina FoodPro® (FPA) (0,60%, pH 8) e a identificação de peptídeos bioativos foi realizada pela técnica de rápida absorção por LC-MS/MS, que consiste no rastreamento rápido de moléculas protonadas de di e tripeptídeos, baseado na perda neutra (NL) de 46 Da. Os espectros obtidos pela análise de LC-MS/MS foram interpretados e a funcionalidade da sequência de aminoácidos dos peptídeos contida

nos espectros de fragmentação foram avaliadas com o auxílio do banco de dados Database of Bioactive Peptides BIOPEP-UWM.

Resultados: Os resultados obtidos exibiram que o processo de hidrólise da proteína de soja com enzima FPA proporcionou a obtenção de proteínas com cadeias mais curtas, características de peptídeos com propriedades bioativas e a análise de LC-MS/MS exibiu que a aplicação do processo de hidrólise promoveu a obtenção de 20 peptídeos (16 di e 12 e tripeptídeos) com bioatividades que corresponderam principalmente à atividade inibitória da ECA, à atividade inibitória da dipeptidil peptidase IV (DPP-IV), atividade antioxidante, ação estimulante e atividade inibitória da renina.

Conclusão: Os peptídeos bioativos alcançados neste estudo apresentam bioatividades relevantes e expressivo potencial funcional e, assim, possibilitam o desenvolvimento de novos ingredientes e, oportunizam maior valor agregado ao subproduto da soja.

Palavras-chave: farelo de soja; di e tri-peptídeos; bioatividade.

Financiador (es): Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq





Referencias

Minkiewicz, P., Iwaniak, A., Darewicz, M. BIOPEP-UWM Database of Peptides: Current Opportunities; 2019.

Norgonierna, A. B., Cadamuroa, C., Gouica, A. L., Mudglic, P., Maqsoodc, S., & FitzGeralda, R. J. Dipeptidyl peptidase IV (DPP-IV) inhibitory properties of a camel whey protein enriched hydrolysate preparation. Food Chemistry. 2019; 279, 70-79.

Coscueta, E. R., Campos, D. A., Osorio, H., Nerli, B. B., & Pintado, M. Enzymatic soy protein hydrolysis: A tool for biofunctional food ingredients Production. Food Chemistry, 100006. 2019; 1-7.

Liu, L., Li, S., Zheng, J., Bu, T., He, G., & Wu, J. (2020). Safety considerations on food protein-derived bioactive peptides. Trends in Food Science & Technology, 96, 199-207. Food Hydrocolloids. 2020; 105, 105844.

Poseli, C. B., Toin, A. p. p., Martines, F. C., Nascimento, N. C., Junior, V, B., Maluf, J., Ribeiro, V. M. S., Rosa, F. A. D., SOUZA, G. H. M. F., & Meurer, E. C. (2020). Tri-and dipeptides identification in whey protein and porcine liver protein hydrolysates by fast LC-MS/MS neutral loss screening and *de novo* sequencing. Journal of Mass Spectrometry. 2020; 65, 4701





SÍNTESE DE POTENCIAIS INIBIDORES DA M^{pro} DO SARS-CoV-2 SELECIONADOS POR DEEP LEARNING E DOCKING MOLECULAR

Arthur Antunes Ferrarezi¹
João Vítor Perez de Souza²
Bernard Maigret³
Érika Seki Kioshima Cotica⁴
Arildo José Braz de Oliveira⁵
Fernanda Andreia Rosa⁶
Regina Aparecida Correia Gonçalves⁵

¹Acadêmico de Pós-Graduação (Doutorado) em Ciências Farmacêuticas, Universidade Estadual de Maringá, Maringá/PR. ²Profissional (Doutorado) – Programa de Pós-Graduação em Biociências e Fisiopatologia, Universidade Estadual de Maringá. ³Pesquisador – *Laboratoire Lorrain de Recherche en Informatique et ses Applications*, Universidade de Lorraine, Nancy, França. ⁴Docente – Departamento de Análises Clínicas e Biomedicina, Universidade Estadual de Maringá. ⁵Docente – Departamento de Farmácia, Universidade Estadual de Maringá. ⁶Docente – Departamento de Química, Universidade Estadual de Maringá

Introdução: A Covid-19 tornou urgente a pesquisa de novos antivirais específicos para o SARS-CoV-2, sendo a Protease Principal (M^{pro}) o alvo mais estudado. O planejamento racional e o uso de ferramentas *in silico* tem sido as abordagens mais utilizadas, pois seus resultados otimizam o processo de seleção e síntese dos compostos mais promissores. Nesse contexto, o núcleo que irá compor a estrutura dos inibidores deve permitir a inserção de diferentes fragmentos moleculares em poucas etapas de reação. Dentre eles, os aza-heterociclos se destacam pela gama de atividades farmacológicas e metodologias de síntese.

Objetivo: Otimização da rota sintética para a obtenção de derivados pirazólicos selecionados por varredura virtual (VV) de uma biblioteca combinatória.

Material e métodos: Os derivados foram planejados a partir do antiviral X77, e aqueles mais promissores foram selecionados por VV empregando o pacote *Deep Purpose* e o software *Gold*. As condições reacionais foram obtidas a partir da literatura; a caracterização dos

produtos foi feita por Ressonância Magnética Nuclear (RMN) de ¹H.

Resultados: A partir da análise dos 100 melhores análogos, propôs-se uma rota sintética de 3 etapas. A primeira consistiu na obtenção do núcleo pirazólico central (I), por reação *one-pot*. Em seguida, o éster presente em I foi submetido a hidrólise com KOH em solução hidrometanólica, cujo ácido carboxílico resultante (II) foi reagido com diferentes ativadores e benzilamina, para a obtenção da amida secundária (III) final. Dentre os ativadores testados, o ácido bórico promoveu 100% de conversão de II em III, cuja transformação foi evidenciada pelo sinal do hidrogênio da amida em δ 11,57 no espectro de RMN de ¹H. O isolamento de III está em processo de otimização.

Conclusão: A rota sintética proposta mostrou ser tecnicamente viável e permitiu a obtenção do produto desejado, e testes estão sendo feitos para o isolamento de III em bons rendimentos.

Palavras-chave: SARS-CoV-2; M^{pro}; Pirazol.

Financiadores: Capes, CNPq, Fundação Araucária, CNRS e RENATER





Referências

Amin SkA, Banerjee S, Gayen S, Jha T. Protease targeted COVID-19 drug discovery: What we have learned from the past SARS-CoV inhibitors? Eur J Med Chem [Internet]. 2021 Feb 13 [cited 2021 Feb 16];113294. Available from: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0223523421001434>

Dai W, Zhang B, Jiang XM, Su H, Li J, Zhao Y, et al. Structure-based design of antiviral drug candidates targeting the SARS-CoV-2 main protease. Science [Internet]. 2020 Jun 19 [cited 2022 Feb 22];368(6497):1331–5. Available from: <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.abb4489>

Rosa FA, Jacomini AP, Vieira da Silva MJ, Pianoski KE, Poletto J, Francisco CB, et al. Controlled Pyrazole-Hydrazone Annulation: Regiodivergent Synthesis of 1H- and 2H-Pyrazolo[3,4-d]pyridazinones. J Org Chem [Internet]. 2023 Aug 4;88(15):11140–9. Available from: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.joc.3c01117>

Huang K, Fu T, Glass LM, Zitnik M, Xiao C, Sun J. Deep Purpose: A deep learning library for drug-target interaction prediction. Bioinformatics. 2020 Dec 1;36(22–23):5545–7. Available from: <https://academic.oup.com/bioinformatics/article/36/22-23/5545/6020256>

Jones G, Willett P, Glen RC, Leach AR, Taylor R. Development and Validation of a Genetic Algorithm for Flexible Docking. J Mol Biol. 1997 Apr;267(3):727–48. Available from: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0022283696908979?via%3Dihub>

