



***Asemeia ovata* (POLYGALACEAE): DETERMINAÇÃO QUANTITATIVA POR CLAE-DAD DE SUBSTÂNCIAS IDENTIFICADAS E PREDIÇÃO *IN SILICO* DE ATIVIDADES BIOLÓGICAS**

José L. C. da Rocha<sup>1\*</sup>, Danielle F. da Silva<sup>2</sup>, Anne R. de Santana<sup>2</sup>, Diego M. da Costa<sup>3</sup>, José F. B. Pastore<sup>4</sup>, Clayton Q. Alves<sup>5</sup>, Manoelito C. S. Junior<sup>6</sup>, Hugo N. Brandão<sup>6</sup>.

<sup>1</sup>Colegiado Farmácia, Universidade de Ensino Superior de Feira de Santana, BA, Brasil.

<sup>2</sup>Programa de Pós-graduação em Recursos Genéticos Vegetais, Universidade Estadual de Feira de Santana, BA, Brasil. <sup>3</sup>Graduação em Farmácia, Universidade Estadual de Feira de Santana, BA, Brasil. <sup>4</sup>Herbário, Universidade Federal de Santa Catarina, SC, Brasil,

<sup>5</sup>Departamento Exatas, Universidade Estadual de Feira de Santana, BA, Brasil.

<sup>6</sup>Departamento Saúde, Universidade Estadual de Feira de Santana, BA, Brasil.\*luiz\_farmaco@hotmail.com.

### INTRODUÇÃO

No Brasil, o gênero *Asemeia* possui 19 espécies (12 endêmicas) e 2 variedades (ambas endêmicas) e algumas delas são encontradas no semiárido baiano. O objetivo deste estudo foi determinar quantitativamente as substâncias identificadas por Cromatografia a líquidos de alta eficiência com detector de arranjo de diodo (CLAE-DAD) em extratos de *Asemeia ovata* e prever suas atividades biológicas por técnicas *in silico*.

### MATERIAL E MÉTODOS

O método de quantificação por CLAE-DAD foi validado de acordo com as diretrizes do International Conference of Harmonization (ICH). A predição das atividades *in silico* foi feita por Triagem Virtual Inversa (TVI), seguido por acoplamento molecular através do programa DOCK 6.7 e avaliação dos perfis de interação intermolecular realizada através do Servidor Protein-Ligand Interaction Profiler (PLIP).

### RESULTADOS

Foi possível identificar e quantificar no extrato bruto de *A. ovata*, através de CLAE-DAD, as

### RESULTADOS

(36,76±0,002 µg/mL), luteolina-7-O-glicosídeo (3,64±0,002 µg/mL), ácido cafeico (52,61±0,005 µg/mL), ácido *p*-cumárico (50,91±0,001 µg/mL) e ácido *trans*-ferúlico (85,16±0,005 µg/mL). A TVI permitiu selecionar, através dos servidores ChemProt 2.0 e DRAR-CPI, os alvos moleculares Anidrase carbônica 12 e Receptor de fator de crescimento epidérmico para a rutina; para a luteolina-7-O-glicosídeo os alvos Cotransportador 2 de sódio/glicose e Proteína quinase CDC42 ativada 1; e para os ácidos cafeico, *p*-cumárico e *trans*-ferúlico os alvos de fator de crescimento epidérmico e Ras-relacionada ao substrato C3 da Toxina botulínica 1, Anidrase carbônica 12 e Ornitina carbamoiltransferase, mitocondrial.

### CONCLUSÃO

Esse trabalho fornece resultados inéditos para a espécie, tanto do ponto de vista químico, como biológico, apresentando boas perspectivas de estudo, com interessante potencial a ser descoberto.

### AGRADECIMENTOS

UEFS, RGV, Capes e FAPESB.

