

## Avaliação do Perfil Antioxidante da Quercetina e Quercetina-Cu(II) e sua relação com logP.

Priscilla S. F. Figueiredo (IC), Roseline F. de Oliveira (IC), Jonatas Gomes da Silva (IC), Silvia Keli B. Alcanfor\* (PQ), Luiz Antonio S. Romeiro (PQ). E-mail: [alcanfor@ucb.br](mailto:alcanfor@ucb.br)

Universidade Católica de Brasília, Aguas Claras, QS 7 lote 1, Brasília-DF

Palavras Chave: Antioxidante, Quercetina, logP

### Introdução

Os estudos dos radicais livres e dos antioxidantes fenólicos têm aumentado bastante nestes últimos anos. A quercetina **1a** é um conhecido antioxidante, abundante na natureza. O mecanismo pelo qual a quercetina exerce sua ação quanto antioxidante resulta de uma combinação de suas propriedades quelante e sequestradora de radicais livres, assim como a inibição da oxidação de membranas<sup>1</sup>. É evidente, portanto estabelecer a relação estrutura química - atividade biológica, através de estudos das propriedades coeficiente de partição (logP) com a atividade antioxidante da substância-alvo. No presente trabalho descreve-se a determinação do logP da quercetina, como uma molécula modelo, na presença de cobre divalente, visando avaliar as propriedades metal quelante e antioxidante.

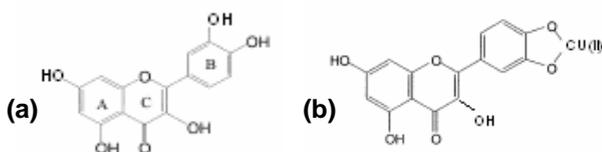


Fig.1:(a) estrutura da Quercetina, (b) Complexo quercetina-cobre(II).

### Resultados e Discussão

Estudo prévio das características espectrais no UV-Vis apontou a existência de interação de íons de Cu(II) com **1a** em pH 7,4. Esta interação causou deslocamento batocrômico significativo em relação ao espectro de **1a** (Figura 2). A literatura<sup>2</sup> relaciona este deslocamento à interação do Cu(II) com o anel B do flavonóide, através da interação do íon metálico com as hidroxilas do grupo catecol. Os resultados aqui obtidos estão de acordo com a literatura. A região do espectro referente à absorção do anel A ficou inalterada nem função da presença de íons Cu(II).

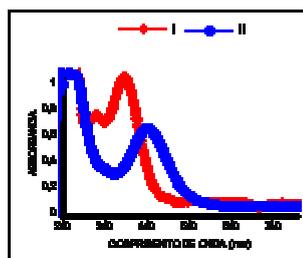


Figura 2: Espectro de **1a** e **1b**

A determinação da solubilidade de **1a** e **1b** foi obtida investigando seu coeficiente de partição em n-octanol/água. Este

parâmetro foi avaliado por medidas de absorção da fase aquosa, após sucessivas adições de n-octanol. O valor experimental de logP 1,45 para **1a** indica interação na fase lipofílica, devido ao baixo pKa do grupo catecol, comparado a flavonóides que contem fenol no anel B, o que evidencia que **1a** tem igual solubilidade nas fases orgânica e aquosa.

Evidenciou-se ainda a drástica diminuição do valor de logP quando a estrutura avaliada foi **1b**.

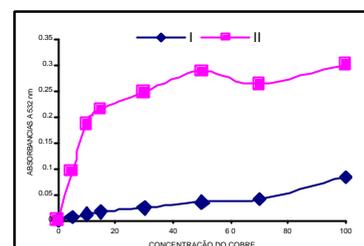


Figura 3: lipoperoxidação da 2-DR

Com o objetivo de comprovar a eficácia da ação antioxidante de **1a**, gerou-se um estresse oxidativo com espécies reativas de oxigênio, ativadas pelo ácido ascórbico e Cu(II), para avaliar a inibição da oxidação lipídica da 2-desoxirribose (2-DR). Envolveram reações do tipo Fenton na presença de **1a**, e também na presença somente de radicais livres, Cu(II) e ácido ascórbico (Figura 3). Os resultados comprovaram que **1a** é um bom quelante e sequestrador de radicais livres, não permitindo a ação das espécies reativas de oxigênio. O ácido ascórbico de acordo com a literatura, atua como próoxidante na presença de metal, gerando espécies reativas de oxigênio, causando uma grande agressão à camada lipídica.

### Conclusões

O composto **1a** demonstrou ser bastante eficaz como sequestrador de radicais livres e quelante. Entretanto estas estruturas apresentaram-se diferentes quanto às suas características lipofílicas, estando esse comportamento relacionado à estrutura química dos compostos.

Através da avaliação do poder antioxidante de **1a** pode-se constatar que o mecanismo de ação oxidante da quercetina difere do ácido ascórbico.

### Agradecimentos

Universidade Católica de Brasília.

<sup>1</sup> Trueba, G. P.; *Rev Cubana Invest. Biomed.* **2003**, 22 (1), 48.

<sup>2</sup> Brown, J. E.; *Biochem. J.* **1998**, 330, 1173.