

Avaliação teórica de produtos majoritários com atividade auxínica do óleo essencial de *Duguetia furfuracea*.

Hércules da Silva Miglio^{1,2*} (PQ), Denise Brentan da Silva¹ (PG), Nídia Cristiane Yoshida¹ (PG), Elayne Cristina de Oliveira Tulli¹ (IC), João Roberto Fabri¹ (TC), João Máximo de Siqueira¹ (PQ)

1- Depto de Farmácia, CCBS, UFMS, e-mail: hercules@nin.ufms.br; 2 - Bolsista programa DCR II – FUNDECT/CNPq Fundação de Apoio do Desenvolvimento do Ensino, UEMS.

Palavras Chave: auxina, óleo essencial, *Duguetia furfuracea*.

Introdução

Auxinas são hormônios de crescimento para as plantas. Substância quimicamente ativa presente em pequenas quantidades¹.

A molécula se liga ao receptor por meios físicos, sendo importante a força eletrostática de atração entre as superfícies da auxina e do receptor. Provavelmente o tamanho e a forma da molécula é que determinam se ela pode ou não agir como auxina.

O óleo essencial das cascas do caule subterrâneo de *D. furfuracea*, planta invasora, submetido a CG/EM, teve em sua constituição química majoritária os metabólitos 2,4,5-trimetoxi-estireno (TME) e asarona [Figura 1]. A avaliação alelopática (inibição de germinação em *Lactuca sativa*) deste óleo mostrou uma atividade indutora de crescimento de radículas nas plântulas de 52% na concentração de 125 µg/ml, esta atividade pode estar associado ao efeito observado em auxinas² e, por esta razão, realizou-se a avaliação teórica comparativa de 1 e 2 com o AIA (ácido indol-3-acético), uma auxina.

Resultados e Discussão

O estudo da conformação e das distâncias entre centros de densidade de cargas positivas e negativas, nas moléculas, foi investigado usando o pacote Gaussian 03, o semi-empírico AM1 e DFT B3LYP/6-31G**. Com o GaussView gerou-se as imagens das três estruturas, o AIA, asarona e 2,4,5-trimetoxi-estireno.

As moléculas devem possuir planaridade, bem como os sítios de ligações terem uma distância ótima entre eles de aproximadamente 0,5nm para possuírem atividades semelhantes de uma auxina³.

Das duas substâncias encontradas em maior quantidade no óleo essencial de *D. furfuracea*, a asarona e o TME, apresentaram testes positivos que comprovam serem auxinas, como os testes efetuados em *Lactuca sativa*. Para o AIA, a distância entre os dois centros de cargas: positivo e negativa foi de 0,51nm, para as outras demais, o valor encontrado foi de 0,47nm [Figura 1].

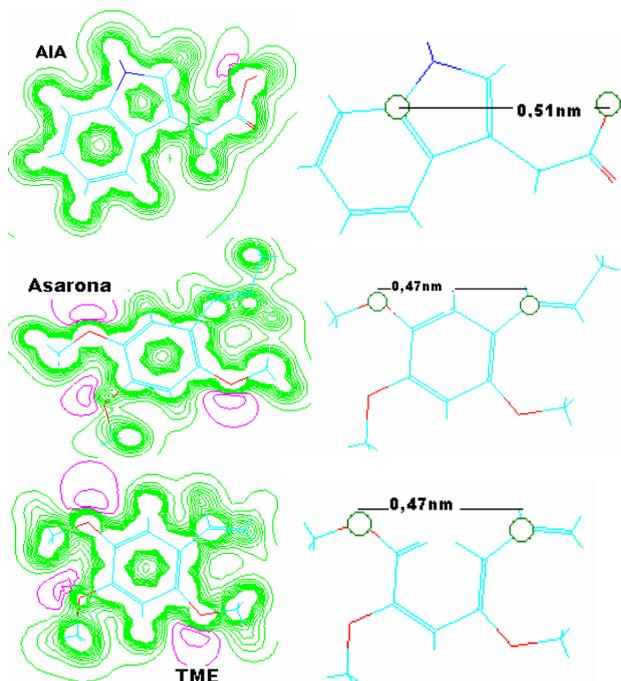


Figura 1 -Análise dos requerimentos necessários para atividade auxínica

Conclusões

Os resultados teóricos vieram reforçar, com argumentos, a análise experimental que comprovam a atividade auxínica da asarona e do TME, sendo que estas foram encontradas em grandes quantidades no óleo essencial das cascas do caule subterrâneo de *D. furfuracea*.

Agradecimentos

CNPq, FUNDECT/MS.

¹ Ferri, M. G.; *Fisiologia vegetal* 2, Ed. USP, São Paulo, 1979.

² Brentan, D. B., Alencar, K. M. C., Valter, J. L., Tulli, E. C. O., Correia, R. P., Oliveira A., Fabri, J. R., Nascimento, E. A., Morais, S., Chang, R., Máximo, J. S.; *Avaliação alelopática dos extratos e exsudato radicular de Duguetia furfuracea - uma planta invasora*, 28ª Reunião da SBQ, Poços de Caldas, 2005.

³ Taiz, L., Zeiger, E.; *Fisiologia vegetal*, Ed. ArtMed, 3ª ed., Porto Alegre, 2004.