

Caracterização por ESI-IT-MSⁿ dos metabólitos secundários presentes na infusão de *Davilla nitida* Vahl (Dilleniaceae)

Clenilson Martins Rodrigues (PG)^{*1}, Daniel Rinaldo (PG)¹, Paola Montoro (PQ)², Sonia Piacente (PQ)², Cosimo Pizza (PQ)², Alba R.M.S. Brito (PQ)³, Wagner Vilegas (PQ)¹ clenilsonmr@gmail.com

¹ Departamento de Química Orgânica, IQ - UNESP, C.P. 355, CEP 14800-900 - Araraquara - SP, Brasil.

² Dipartimento di Scienze Farmaceutiche, Facoltà di Farmacia, Università degli Studi di Salerno, Fisciano, Itália.

³ Departamento de Fisiologia e Biofísica - IB - UNICAMP, CP 6109, CEP 13083-970, Campinas - SP, Brasil.

Palavras Chave: *Davilla nitida*, ESI-IT-MS, Dilleniaceae.

Introdução

A investigação de infusões frequentemente utilizadas na medicina popular é um tema que deve receber grande atenção, exatamente pelo fato de que são escassos os estudos que comprovam a veracidade das informações etnofarmacológicas. Por outro lado, poucas são as técnicas capazes de dar informações rápidas e precisas sobre a constituição química de uma matriz que apresente compostos de alta polaridade. Sendo assim, o objetivo deste trabalho foi realizar a caracterização dos constituintes químicos presentes no infuso das folhas de *D. nitida* usando a técnica ESI-IT-MSⁿ.

Resultados e Discussão

O infuso das folhas de *D. nitida* liofilizado foi submetido à análise por injeção direta usando ionização negativa. A Figura 1 mostra o perfil espectral da infusão, onde os sinais em m/z 169 e 191 correspondem aos ácidos gálico e quínico, respectivamente.

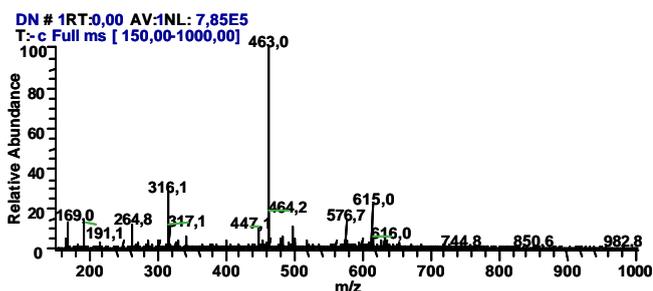


Figura 1. Espectro ESI-MS da infusão das folhas de *D. nitida*, full scan, modo negativo.

O espectro MS/MS do íon pseudo-molecuar em m/z 447 produziu um íon-filho em m/z 301 [M - 146 - H]⁻ devido a perda de uma deoxihexose, este fato corrobora com a presença da querceína-3-O-a-rhamnopiranosídeo. O íon de maior abundância, m/z 463 produziu um fragmento MS/MS em m/z 317 [M - 146 - H]⁻, devido a perda de uma unidade deoxihexose, a qual confirma a presença da 2^o Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

miricetina-3-O-a-rhamnopiranosídeo. O espectro MS/MS do íon-parente em m/z 615 gerou íons-filhos em m/z 463 [M - 152 - H], devido a perda de uma unidade galolil, e em m/z 317, o qual representa a perda de um grupo galolil e de uma deoxihexose, esta informação confirma a presença em *D. nitida* dos dois flavonóides heterosídeos acetilados, miricetina-3-O-(2^o-O-Galolil)-a-rhamnopiranosídeo e miricetina-3-O-(3^o-O-Galolil)-a-rhamnopiranosídeo, descritos em estudo preliminar¹. As duas agliconas quercetina e miricetina deram picos de baixa intensidade em m/z 301 [M - H]⁻ e m/z 317 [M - H]⁻, respectivamente. O espectro MS/MS do íon molecular de m/z 316 [M]⁻ gerou fragmentos secundários em m/z 271 [M - 45]⁻, devido à perda de uma unidade CO₂H e em m/z 203 [M - 113]⁻, devido à perda de uma unidade terminal de C₅H₇CO₂H (ácido 2-metil,2,4-pentadienóico). Esse tipo de fragmentação equivale às encontradas para os ácidos oxoretinóicos.²

Conclusões

Os resultados obtidos comprovam que a técnica ESI-IT-MS é uma poderosa ferramenta de caracterização e identificação a ser usada na investigação de metabólitos secundários de alta e média polaridade. Neste trabalho foi possível realizar confirmação dos dados estruturais para os compostos encontrados na infusão de *D. nitida*.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, BIOTA/FAPESP.

¹ Rodrigues, C. M.; Rinaldo, D.; Olea, R. S. G.; Sannomiya, M.; Santos, L. C.; Hiruma-Lima, C. A.; Brito, A. R. M. S. e Vilegas, W. 28^a RASBQ. 2005, PN, 185.

² Wingerath, T.; Kirsch, D.; Spengler, B. e Stahl, W. Anal. Biochem. 1999, 272, 232.