

Caracterização por ESI-IT-MSⁿ dos metabólitos secundários presentes na infusão de *Neea theifera* Oerst. (Nyctaginaceae)

Daniel Rinaldo (PG)^{1*}, Clenilson Martins Rodrigues (PG)¹, Paola Montoro (PQ)², Sonia Piacente (PQ)², Cosimo Pizza (PQ)², Wagner Vilegas (PQ)¹

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

E-mail: danielrinaldo@universia.com.br

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

Palavras Chave: *Neea theifera*, ESI-IT-MS, Nyctaginaceae, Flavonóides.

Introdução

ESI-IT-MS (*Electrospray Ionisation and Ion-Trap Mass Spectrometry*) é uma ferramenta importante para a investigação de perfis químicos de espécies vegetais, evitando-se caras e demoradas etapas de fracionamento que podem levar ao isolamento de substâncias já conhecidas. A espécie estudada nesse trabalho é *Neea theifera* (Nyctaginaceae), típica de cerrado e conhecida popularmente como “Capa-rosa-do-campo”¹. A infusão das folhas é usada popularmente como anti-desintérica, anti-inflamatório e anti-úlceras². Sendo assim, o objetivo deste trabalho foi realizar a caracterização dos constituintes químicos presentes no infuso das folhas de *N. theifera* utilizando a técnica ESI-IT-MSⁿ.

Resultados e Discussão

O infuso das folhas de *N. theifera* liofilizado foi submetido à análise por injeção direta usando ionização em modo negativo.

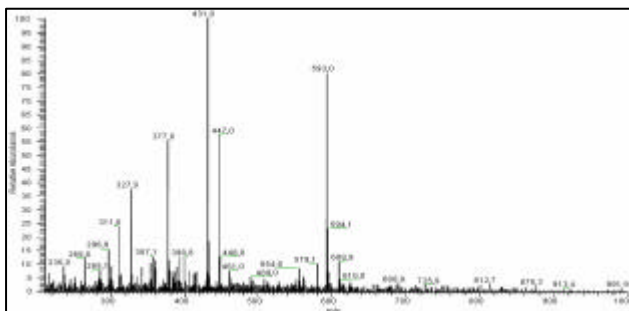


Figura 1. Espectro ESI-MS da infusão das folhas de *N. theifera*, full scan, modo negativo.

A figura 1 mostra o perfil espectral de *N. theifera* obtido em uma energia de colisão de 25% e os fragmentos gerados representam as moléculas desprotonadas $[M - H]^-$ encontradas na infusão.

A fim de obter mais informações sobre a composição química, foi realizado experimentos de segunda ordem (MS^2) dos principais íons. Observa-se na figura 1 a presença de fragmentos em m/z 269 e m/z 285, característicos de flavonóides.

É possível observar também que as diferença entre m/z 269 e m/z 431, m/z 593 e m/z 431, m/z 285 e m/z 447, m/z 609 e m/z 447 é de 162, referente a uma unidade de hexose.

Os espectros MS^2 dos fragmentos m/z 431, 447, 593 e 609 apresentaram íon base $[M - H - 120]^-$ o qual é característico de flavonas C-glicosiladas com rompimento da ligação de uma hexose no ponto $^{0,2}X$ $[M - 120 - H]^-$. Um fragmento minoritário $[M - 18]^-$ também foi observado nos espectros. A eliminação de água é um forte indicativo de que a hexose esteja ligada na posição C6 ou C8 do núcleo da flavona³.

Com os dados observados no perfil (figura 1) e nos espectros MS^2 dos principais fragmentos, foi possível determinar que a infusão possui como compostos majoritários flavonas C-glicosiladas derivadas da apigenina $[M-H]^- = 269$ e luteolina $[M - H]^- = 285$, sendo estas: vitexina e/ou iso-vitexina, vicenina-2, orientina e/ou iso-orientina e lucenina-2. Essa composição foi confirmada posteriormente por estudos fitoquímicos realizados com o extrato metanólico das folhas de *Neea theifera*⁴.

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 prever de forma rápida e precisa as estruturas dos compostos encontrados na infusão das folhas de *N. theifera*.

Agradecimentos

BIOTA-FAPESP, CNPq.

¹ Durigan, G.; Baitello, J. B.; Franco, G. A. D. C.; de Siqueira, M. F. *Plantas do Cerrado Paulista: Imagens de uma paisagem ameaçada*. São Paulo. **2004**.

² Correa, M. P. *Dicionário das plantas úteis do Brasil e das exóticas cultivadas*. Rio de Janeiro. **1984**, v. 6.

³ Cuyckens, F.; Claeys, M. J. *Mass Spectrom.* **2004**, 39, 1.

⁴ Rinaldo, D.; Rodrigues, C. M.; Sannomiya, M.; dos Santos, L. C.; Tamashiro, J.; Brito, A. R. M. S. e Vilegas, W. *29ª RASBQ*. **2006**, PN 153.