

Estudo da Relação Estrutura Química e Atividade Antioxidante de Derivados Fenólicos pelo Método de DPPH

Patrícia de S. Boaventura (IC)*, Thiago G. Lima (IC)*, Luiz Carlos C. de Jesus (IC), Luiz A. S. Romeiro (PQ), Sílvia K. de B. Alcanfor (PQ) patriciasboaventura@yahoo.com.br; thiagolima.df@gmail.com

Universidade Católica de Brasília, QS 07 lote 1, EPCT, Águas Claras, Taguatinga-DF, CEP: 71.966-700

Palavras Chave: derivados fenólicos, atividade antioxidante, DPPH

Introdução

Compostos fenólicos são substâncias abundantes no reino vegetal, possuindo um ou mais anéis aromáticos com pelo menos um grupo hidroxila. Em geral podem reagir com radicais livres, devido à facilidade com que o átomo de hidrogênio do grupo hidroxila pode ser abstraído por um radical livre, resultando em uma estrutura quinóide que suporta a presença de um elétron desemparelhado¹.

A literatura traz que compostos fenólicos dihidroxilados apresentam atividade antioxidante crescente na seguinte ordem: *meta* < *orto* < *para*². Este trabalho pretende discutir a relação entre a estrutura química e atividade antioxidante de alguns derivados fenólicos através do método de DPPH³ focando a relevância de substituintes e subunidades no perfil desejado.

Resultados e Discussão

Para este estudo foram selecionados Catecol (**1**), Resorcinol (**2**) Hidroquinona (**3**), Ácido Cafeico (**4**), Ácido Ferúlico (**5**) e Guaiacol (**6**) (Figura 1), todos comerciais Sigma-Aldrich. Às soluções etanólicas destes compostos, foi adicionado 0,6 mL da solução estoque DPPH em etanol 148 µg/mL, e após 30 minutos em banho-maria a 37°C, suas absorvâncias foram determinadas em 515 nm.

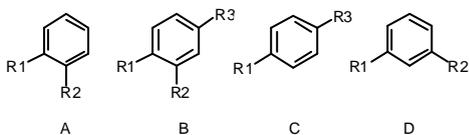


Figura 1 - Compostos fenólicos: **A.** R1=R2=OH (Catecol), R1=OH,R2=OCH₃ (Guaiacol); **B.** R1=R2=OH, R3=C₃H₃O₂ (Ácido Cafeico); R1=OH, R2=OCH₃, R3=C₃H₃O₂ (Ácido Ferúlico); **C.** R1=R3=OH (Hidroquinona); **D.** R1=R2=OH Resorcinol.

Os percentuais de DPPH remanescentes (%DPPH_{rem.})⁴ foram determinados a partir da equação da curva de calibração e dos valores de absorvância para cada concentração testada. A concentração efetiva (EC₅₀), quantidade de antioxidante necessária para decrescer a concentração inicial de DPPH em 50%, foi determinada (Tabela 1).

Tabela 1. Determinação da concentração efetiva (µg/L) de derivados fenólicos pelo ensaio de DPPH

Compostos	1	2	3	4	5	6
EC ₅₀	84	N.O.	45	335	670	724

N.O.- Não observado

Considerando os derivados benzenodiolícos, os resultados obtidos corroboram os dados da literatura com melhor perfil antioxidante para **3** em função da maior estabilidade do radical em face das estruturas de ressonância (ER) e sua tautomerização à *p*-benzoquinona, seguida de **1** com perfil semelhante em ER e *orto*-tautômero e finalmente **2** que não apresentou EC₅₀.

Comparação entre **1** e **6** sugere que a ligação de hidrogênio intramolecular (LHI) em **6** diminui a atividade antioxidante, em função da menor disponibilidade do hidrogênio fenólico para abstração pelo DPPH. Ainda que LHI exista em **1**, sempre haverá um hidrogênio que permite a manutenção do perfil antioxidante.

A presença da subunidade propenóica em **5** melhora de forma discreta a atividade de **6** provavelmente devido à inserção de novo sítio antioxidante: o grupo carboxila.

Finalmente quando comparamos os perfis de **1** e **4** podemos sugerir que embora a presença do grupo carboxila bem como o aumento de ER, incluindo a formação de uma metilenoquinona, contribuam para o perfil antioxidante de **4**, estas características não superam a estabilização via *o*-quinona de **1**. Vale salientar que estes experimentos foram realizados em etanol, onde a solubilidade dos ácidos é menor que os derivados dihidroxilados.

Conclusões

O presente estudo permitiu identificar características estruturais relevantes para o perfil antioxidante, cuja avaliação de outros derivados e solventes constituem as perspectivas deste trabalho.

Agradecimentos

Universidade Católica de Brasília

¹ Pannala A.S. et al., *Biochem Biophys Res Com.* **2001**; 282: 1161.

² Dziedzic S.Z., Hudson B.J.F.: *Food Chemistry* **1984**,14, 45.

³ Molyneux, P., Songklanakarín J. *Sci. Technol.* **2004**,26(2),211.

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)

⁴ *Sousa C M de M., Chaves, M.H., Química Nova, 2007,30(2), 1.*