

Detecção *in silico* de alguns constituintes majoritários presentes em espécies do gênero *Strychnos* (Loganiaceae) usando CLAE-DAD/EMAR.

Alice Tereza Sampaio de Matos (PG)*¹, Patrícia Mendonça Pauletti (PQ)¹, Dulce Helena Siqueira Silva (PQ)¹, Vanderlan da Silva Bolzani(PQ)¹ e Ian Castro-Gamboa (PQ)¹,

¹NuBBE- Núcleo de Bioensaios, Biossíntese e Ecofisiologia de Produtos Naturais - Instituto de Química - UNESP, C. P. 355, CEP 14800-900, Araraquara, SP.

alicetsmatos@yahoo.com.br

Palavras Chave: desreplcação, EMAR/CLAE-DAD, detecção micromolecular *in silico*.

Introdução

Dando continuidade ao estudo de plantas bioativas do Cerrado e Mata Atlântica, duas espécies de *Strychnos*: *pseudoquina* e *brasiliensis* foram selecionadas para estudos de desreplcação devido a resultados preliminares promissores na inibição de polimerização do heme (anti-maláricos) e antioxidante (DPPH). Para orientar apenas o estudo dos extratos ou das frações que possuam alvos micromoleculares promissores, aplicaram-se técnicas analíticas de detecção *in silico* incorporadas a metodologias cromatográficas de construção de perfis micromoleculares já implantadas no nosso grupo. A metodologia *in silico* utiliza o software Bruker Data Analysis (Ver. 3.2) conjugado aos dados de massas de alta resolução de mais de 170.000 moléculas compiladas no dicionário de produtos naturais¹.

Resultados e Discussão

Uma fração dos extratos brutos dos caules de *S. brasiliensis* e *S. pseudoquina* (2,5 mg) foi submetida a análise via CLAE-DAD/EMAR. Durante a análise cromatográfica foi utilizado um gradiente linear de 20 minutos utilizando, como fase móvel, H₂O:MeOH; iniciando com 10% de MeOH, e finalizando com 100% de MeOH a uma razão de fluxo de 3,0 mL/min. A separação foi realizada usando uma coluna monolítica Phenomenex ODS.

O espectro de contagem dos íons totais (TIC) gerado pelo EMAR (modo positivo) foi analisado, processado e interpretado, gerando a fórmula molecular de alta resolução para cada íon majoritário. Após comparação dos dados de massas de alta resolução da base DNP, foi possível detectar, em ambas as espécies, duas propostas estruturais similares: uma bisamida contendo um resíduo de putrescina: a grandiamida B e um alcalóide diamidopirrolidínico: a odorina, ambos exibindo um aduto cationizado em *m/z*: 301,19125.

Para poder discriminar entre ambas as propostas, um experimento EMAR-IES-EM-EM foi realizado sendo possível definir a grandiamida B como a molécula presente nos extratos (figura 1).

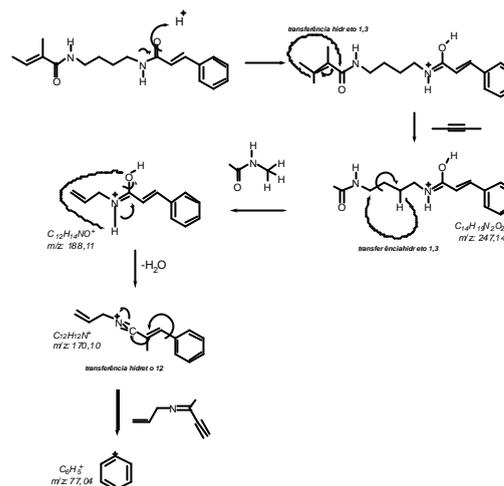


Figura 1. Proposta de fragmentação para a grandiamida B.

Bisamidas são alvos moleculares interessantes devido a suas propriedades citotóxicas seletivas e antivirais². Não há relatos na literatura sobre bisamidas em *Strychnos*. No entanto, este tipo de alcalóide é acumulado em plantas do gênero *Aglaia* (Meliaceae). Estudos da biogênese de alcalóides bisindólicos heptacíclicos em *Strychnos*, propõem a inserção de putrescina durante a sua biossíntese³. Estudos mais profundos sobre a presença de co-metabólitos deste tipo nos extratos de *S. brasiliensis* e *S. pseudoquina* estão em andamento.

Conclusões

A técnica CLAE-DAD/EMAR mostrou-se eficiente na detecção *in silico* dos constituintes majoritários micromoleculares presentes nos extratos brutos de *S. pseudoquina* e *S. brasiliensis*. A técnica de análise foi rápida e seletiva, auxiliando no processo de desreplcação da matriz. Para a confirmação dos metabólitos de interesse será necessário o isolamento dos constituintes e uso de outras técnicas espectroscópicas como RMN.

Agradecimentos

À FAPESP, BIOTA-FAPESP, CAPES e CNPq pelo auxílio à pesquisa e bolsas concedidas.

1. <http://www.chemnetbase.com/>

2. Inada, A, et al. *Phytochemistry*, **2000**, 53, 1091-1095.

3. Scott, A. I and Wei, C. C. *J. Am. Chem Soc.*, **1972**, *94*, 8263-8265