

# Sesquiterpenos lactonizados, descritores moleculares e mapas auto-organizáveis utilizados no estudo quimiotaxonômico da tribo Heliantheae (Asteraceae)

Marcus T. Scotti<sup>1</sup> (PG)\*, Mauro Vicentini Correia<sup>1</sup> (IC), Marcelo J. P. Ferreira<sup>1</sup> (PQ), Vicente P. Emerenciano<sup>1</sup> (PQ). \*mtscotti@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Química, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 26077, 05513-970, São Paulo, SP, Brasil.

Palavras Chave: Heliantheae, Sesquiterpenos Lactonizados, Descritores Moleculares, Kohonen

## Introdução

Os sesquiterpenos lactonizados (SLs) são um grupo de substâncias cuja diversificação estrutural aliada à atividade biológica, resultaram em um grande interesse de pesquisa. Essa classe de produtos naturais apresenta um elevado índice de produção desses metabólitos é verificado na família Asteraceae. Comparações das diferenças de SLs (Figura 1) de diferentes táxons podem fornecer resultados interessantes que contribuem para o entendimento da sistemática da família. Nesse tipo de abordagem, vários métodos de análise podem ser empregados, dentre eles os descritores moleculares, obtidos a partir das estruturas tridimensionais (3D) dos SLs.

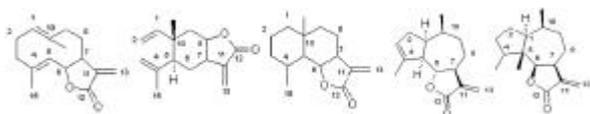


Figura 1. Esqueletos dos principais tipos de SLs.

O objetivo desse trabalho é contribuir para o estudo quimiosistemático da tribo Heliantheae, utilizando os descritores moleculares dos SLs produzidos na tribo com a finalidade de classificar suas subtribos, comparando os resultados com o estudo de Stuessy<sup>1</sup>, que utiliza o número de cromossomos e a morfologia das plantas (Figura 2-a).

## Resultados e Discussão

Após revisão bibliográfica, os 220 SLs foram adicionados diretamente no banco de dados da nova versão do sistema especialista denominado SISTEMAT X. As coordenadas 3D dos SLs foram geradas utilizando o “software” CORINA, a partir de dados de constituição em 2D das moléculas arquivadas no SISTEMAT X. Os valores das energias dos compostos foram minimizados com o emprego do método de mecânica molecular MM<sup>+</sup> e, a seguir, pelo método semi-empírico AM1, utilizando o “software” HyperChem 6.03. Para a obtenção dos 1664 descritores moleculares foi utilizado o programa DRAGON v 5.4. Os descritores altamente correlacionados ( $r > 0.99$ ), aqueles que apresentavam valores constantes ou apenas um valor diferente na 31ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

série foram eliminados, restando 776. A seguir, foram adicionadas as 294 ocorrências botânicas, extraídas do SISTEMAT X, as quais compreendem a classificação botânica (tribo, subtribo, gênero e espécie). Para separação dos dois principais ramos de subtribos (A e C) da tribo Heliantheae (figura 2-a), foi utilizado o pacote SOM (Self Organizing Map) toolbox 2 para Matlab v.6.5. Na figura 2-b, observa-se uma divisão nítida das áreas ocupadas pelos ramos A (azul) e C (vermelho) no SOM.

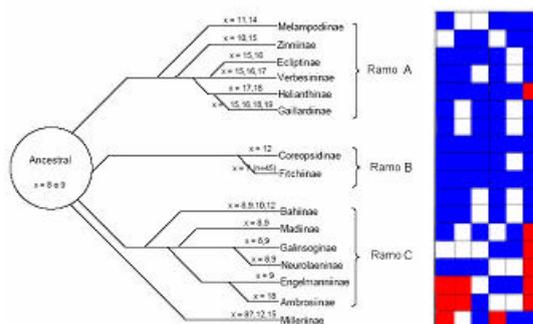


Figura 2. a) Similaridade entre as subtribos da tribo Heliantheae. b) SOM obtido classificando os ramos (figura 2-a) A (cor azul) e C (cor vermelha).

Tabela 1 Resultados classificatórios das subtribos utilizando os descritores gerados dos SLs e o SOM.

Ramo	Ocorrências	Nº de acertos	% de acerto
Ramo A	239	226	94.6%
Ramo C	55	44	80.0%
Total geral	294	270	91.8%

## Conclusões

A partir dos descritores moleculares 3D obtidos das estruturas químicas dos SLs, o SOM obteve resultado significativo para a diferenciação dos ramos A e C de subtribos, corroborando com os resultados de Stuessy<sup>1</sup>. A alta correlação entre os dados químicos 3D obtidos dos metabólitos é decorrente da via produtora dessas substâncias, as quais empregam essencialmente enzimas que possuem sítios ativos inerentemente 3D.

## Agradecimentos

*Sociedade Brasileira de Química ( SBQ)*

CAPES, FAPESP, CNPq.

<sup>1</sup>Stuessy T.F. 'The Biol. and Chem. of the Compositae', **1997**  
Academic Press, London.

<sup>2</sup>Seaman, F. C. *Bot. Rev.* **1982**, *48*, 123.