

Determinação das estruturas tridimensionais de isovitexina-2''-O-ramnopiranosídeo, uma flavona rotamérica isolada de *Mimosa xanthocentra* (Mimosaceae)

Luiza Maria M. Camargo¹ (PG)*, Carlos Roland Kaiser² (PQ), Jean-Pierre Férézou (PQ)³, Sônia Soares Costa¹ (PQ)

*luizamc@nppn.ufrj.br

¹Laboratório de Produtos Naturais Bioativos (LPN-Bio), NPPN, UFRJ.

²Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear (LabRMN), IQ, UFRJ.

³DCSO, Ecole Polytechnique, Palaiseau, França

Palavras Chave: *Mimosa xanthocentra*, flavonóides, rotâmeros, estruturas tridimensionais

Introdução

Mimosa xanthocentra Mart. (dorme-dorme) é uma planta herbácea pertencente a um gênero medicinal e utilizada na dieta de cervos-do-pantanal e veados-campeiros, dois mamíferos ameaçados de extinção no Pantanal^{1,2,3}.

Previamente, foi relatado o isolamento e caracterização estrutural de isovitexina-2''-O-ramnopiranosídeo, cujos dados de RMN sugeriam a presença de dois isômeros rotacionais (rotâmeros) para essa molécula. Esta flavona é o primeiro flavonóide isolado em *M. xanthocentra*, inédita no gênero *Mimosa* L.^{3,4}.

O presente trabalho visa aprofundar os estudos sobre a rotameria de isovitexina-O-2''-ramnopiranosídeo através de experimentos de RMN com variação de temperatura e modelagem molecular.

Resultados e Discussão

Os espectros de RMN de ¹H e DEPT 135, nas temperaturas de 22 °C e 60 °C, foram realizados em espectrômetro Bruker Avance, modelo DRX 300 MHz, em DMSO-d₆.

Analisando-se os espectros de RMN de ¹H e DEPT, observa-se que, com o aumento da temperatura, os sinais que se encontravam duplicados a 22 °C aparecem como um único sinal a 60 °C, confirmando a existência de dois rotâmeros para esse flavonóide. O efeito desse tipo de isomerismo apresenta-se mais pronunciado nos hidrogênios e carbonos da porção glicídica da molécula, visto que a maioria dos sinais referentes às moléculas de glucose e ramnose coalescem com aumento da temperatura. A integração dos sinais nos espectros de RMN de ¹H (22 °C e 60 °C) permite verificar uma proporção de praticamente 1:1 para os dois rotâmeros.

As estruturas tridimensionais para os dois rotâmeros puderam ser propostas com base em análises de modelagem molecular. Os cálculos foram

realizados em software CS Chem3D Pro, alternando simulações de dinâmica molecular e minimização de campo de força molecular MM2. As estruturas tridimensionais para os dois rotâmeros são mostradas na **Figura 1** e diferem essencialmente no arranjo da unidade dissacarídica em relação ao plano do esqueleto da parte aglicona.

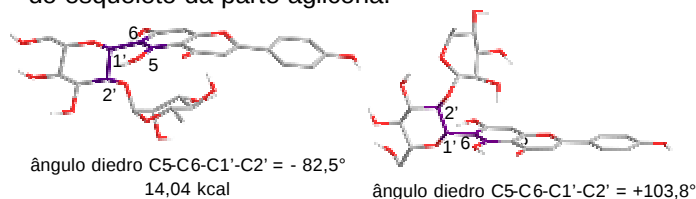


Figura 1: Dois confôrmeros de isovitexina-2''-O-ramnopiranosídeo.

Conclusões

A flavona isovitexina-2''-O-ramnopiranosídeo, o primeiro flavonóide isolado em *M. xanthocentra*, apresentou-se sob a forma de rotâmeros em solução de DMSO-d₆, cuja existência foi confirmada pelos experimentos de RMN com variação de temperatura. Adicionalmente, os estudos preliminares de modelagem molecular permitiram verificar duas conformações principais para esse flavonóide.

Este é o segundo relato de rotamerismo para esse flavonóide. Nossos resultados constituem a primeira proposta de estrutura tridimensional dos dois rotâmeros.

Agradecimentos

SESC, CAPES, CNPq.

¹Costa, S. S.; Oliveira, D. B.; Manço, A. M.; De Melo, G. O.; Cordeiro, J. L. P.; Zaniolo, S.; Negrelle, R.; Oliveira, L. F. B. J. Biol. Sienc, **2006**, 6(5), 840-846

²Mors, W. *Medicinal Plants of Brazil*, **2000**, 237

³Camargo, L. M. M. Dissertação de Mestrado, NPPN, UFRJ, **2007**

⁴Rayyan, S.; Fossen, T.; Nateland, S.; Andersen, Ø. M. *Phytochem Anal.* **2005**, 16, 334-341.