

## Detecção *in silico* dos constituintes lipofílicos micromoleculares majoritários das folhas de *Garcinia gardneriana* (Clusiaceae), fazendo uso de técnicas hífenadas.

Rosilene Cristina Rossetto Burgos (PG)\*<sup>1</sup>, Alberto Camilo Alécio (PQ)<sup>1</sup>, José Eduardo de Oliveira (PQ)<sup>2</sup>, Dulce Helena Siqueira Silva (PQ)<sup>1</sup>, Vanderlan da Silva Bolzani (PQ)<sup>1</sup> e Ian Castro-Gamboa (PQ)<sup>1</sup>,

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

<sup>2</sup>CEMPEQ – Centro de Monitoramento e Pesquisa da Qualidade de Combustíveis, Petróleo e Derivados - Instituto de Química - UNESP, C. P. 355, CEP 14800-900, Araraquara, SP.

\*rose\_quimica@yahoo.com.br

Palavras Chave: *Garcinia gardneriana*, CG-EM, detecção micromolecular *in silico*

### Introdução

A família Clusiaceae compreende, aproximadamente, 45 gêneros e 1370 espécies, de ampla distribuição nas regiões tropicais<sup>1</sup>. Dentre os seus gêneros, a espécie *Garcinia gardneriana* não possui relatos na literatura sobre a sua composição química, apesar do reconhecido potencial do seu extrato etanólico na inibição de polimerização do heme (95,7%) e, antioxidante, através da redução do radical livre DPPH (IC<sub>50</sub>: 13µg/mL), usando vitamina E como controle (IC<sub>50</sub>: 5,25µg/mL).

Visando uma abordagem experimental rápida e racional, o NuBBE investe no desenvolvimento de métodos de desreplicação e metodologias analíticas *in silico*, utilizando técnicas acopladas tais como CLAE/DEQ/DAD, EMAR/CLAE-DAD e CG/EM, orientando a seleção dos metabólitos de interesse presentes em matrizes brutas<sup>2</sup>. Essas técnicas analíticas necessitam apenas de pequenas quantidades de amostra bruta (~ 1-2 mg) permitindo inferir aspectos espectroscópicos e físico-químicos dos quimiotipos presentes em mistura, favorecendo a escolha da separação e purificação apenas das micromoléculas com potenciais biológicos promissores.

### Resultados e Discussão

Os extratos selecionados para o estudo em questão foram o extrato hexânico e a fração lipofílica (obtida através de extração líquido-líquido do extrato etanólico com hexano). Devido à baixa polaridade das amostras foi empregada a técnica CG-EM, fazendo uso da ionização por impacto eletrônico, uma coluna DB-1, gás de arraste He, temperaturas programadas: 50°C (3 min) - 50 a 295 °C (2°C/min). O TIC positivo do CG forneceu a massa molecular de baixa resolução de cada íon detectado. Os dados obtidos foram comparados

com bases de dados comerciais e caseiras. Os principais constituintes lipofílicos detectados e elucidados estão relacionados na figura 1.

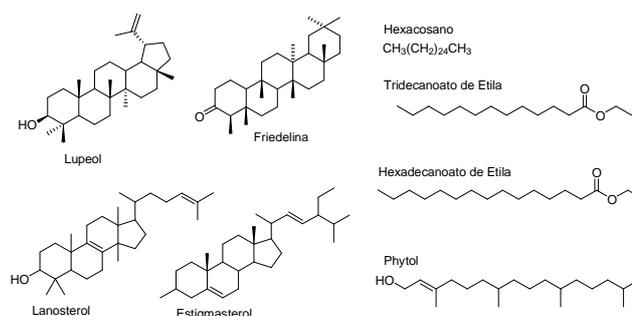


Figura 1. Constituintes detectados *in silico* da fração lipofílica das folhas de *G. gardneriana*

### Conclusões

A técnica CG/EM mostrou-se eficiente na detecção dos compostos lipofílicos, auxiliando na desreplicação das matrizes analisadas e na construção do perfil micromolecular da espécie. As demais frações encontram-se em fase de análise através de técnicas como LC-EM/EM e qRMN, visando a confirmação estrutural dos compostos detectados e a geração do perfil molecular total dos extratos brutos. Posteriores micro-separações, em placas de 96 cavidades, permitirão a detecção dos metabólitos bioativos presentes nos extratos orientando separações cromatográficas racional em larga escala.

### Agradecimentos

À FAPESP, CAPES e CNPq pelo auxílio à pesquisa e pela bolsa concedida.

<sup>1</sup> Mabberley, D.J. The plant-book. 6ª. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1997

<sup>2</sup> Pivatto et al., *Journal of the Brazilian Chemical Society*, 2005, 16, 1431 – 1438.