

Constituintes majoritários das espécies *Qualea grandiflora* e *Qualea cordata* (Vochysiaceae).

Fausto Carnevale Neto*(PG); Alan Cesar Pilon(PG); Marcos Marçal Ferreira Queiroz(PG); Márcia Nasser Lopes(PQ); Dulce Helena Siqueira Silva (PQ); Vanderlan Bolzani(PQ); Ian Castro-Gamboa(PQ).

Núcleo de Bioensaios, Biossíntese e Ecofisiologia de Produtos Naturais– NuBBE – UNESP - Instituto de Química - Departamento de Química Orgânica, Rua Francisco Degni s/nº - 14800-900, Araraquara, São Paulo.

Palavras Chave: *Qualea grandiflora*, *Qualea cordata*, técnicas hífenadas, desreplicação, detecção *in silico*

Introdução

A desreplicação é uma abordagem analítica onde são incorporadas detecções *in silico* de compostos conhecidos junto a técnicas hífenadas, com o intuito de evitar o seu re-isolamento e assim, acelerar a seleção de matrizes promissoras.^{1,2}

Neste trabalho foi desenvolvida uma metodologia analítica de detecção de moléculas bioativas para *Qualea grandiflora* e *Q. cordata*, duas espécies da família Vochysiaceae presentes no Cerrado Brasileiro com potencial etnofarmacológico, através da elaboração de perfis cromatográficos e de bioatividade fazendo uso de técnicas hífenadas como CLAE-EMAR-IES e o bioensaio *in vitro* de inibição de redução do radical estável DPPH (atividade antioxidante).

Resultados e Discussão

A determinação da atividade antioxidante dos extratos e frações das folhas e ramos das espécies de *Qualea* foi avaliada conforme método de redução do radical DPPH (2,2-difenil-1-picrilhidrazila).

Os resultados obtidos indicaram forte atividade antioxidante para as frações AcOEt dos ramos de *Q. grandiflora* (IC₅₀: 7,8 µg/mL) e para as frações AcOEt (IC₅₀: 5,1 µg/mL) e *n*-butanólica das folhas de *Q. cordata* (IC₅₀: 3,9 µg/mL) quando comparados ao padrão rutina (IC₅₀ 5,0 µg/mL).

A resposta antioxidante pode ser justificada pela presença de quimiotipos fenólicos, já detectados anteriormente nas espécies em estudo.

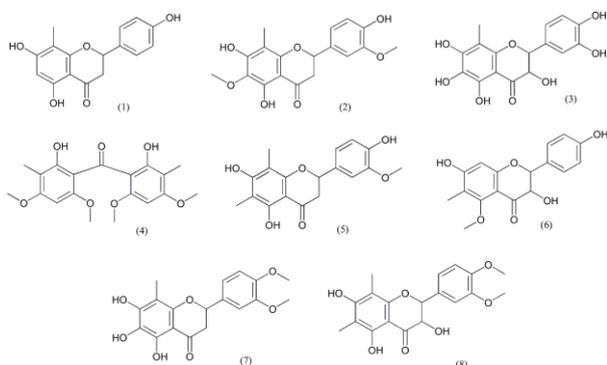


Figura 1. Moléculas detectadas por CLAE-EMAR-IES para *Qualea grandiflora* e *Q. cordata*.

Os dados obtidos pela técnica hífenada CLAE-EMAR-IES permitiram a detecção *in situ* de 8-metilnaringenina (1); 4',5,7-triidroxi-3',6-dimetoxi-8-metilflavanona (2); 3',4',5,6,7-pentaidroxi-8-metildiidroflavonol (3); Bis(2-hidroxi-4,6-dimetoxi-3-metilfenil)-metanona (4) da fração AcOEt dos ramos de *Q. grandiflora* e 4',5,7-triidroxi-3'-metoxi-6,8-dimetilflavanona (5); 5,6,7-triidroxi-3',4'-dimetoxi-8-metilflavanona (6); 4',7-diidroxi-5-metoxi-6-metildiidroflavonol (7) e 3',4'-dimetoxi-5,7-diidroxi-6,8-dimetildiidroflavonol (8) na fração AcOEt nas folhas de *Q. cordata*.

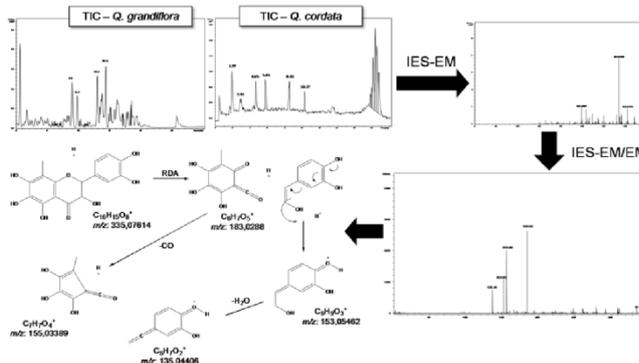


Figura 2. Dados de IES-EM/EM em modo positivo e propostas de fragmentação de espécies de *Qualea*.

Conclusões

A metodologia desenvolvida permitiu a rápida detecção de 8 substâncias já relatadas em *Qualea* e justificadas por propostas de fragmentação fazendo uso de experimentos Tandem de CLAE-EMAR-IES.

O ensaio de redução do radical DPPH permitiu a análise *in silico* e detecção de flavonóides com conhecida ação antioxidante³.

Os padrões de substituições de grupos metila em C-6 e C-8 sugerem valor quimiosistemático já que é a primeira vez que tais substâncias são reportadas no gênero.

Agradecimentos

Ao suporte financeiro FAPESP e CNPq

1. Y. Konish *et al.*, *Analytical Chemistry* **79**, 1187(2007)
2. I. Castro-Gamboa *et al.*, *Planta Medica* **74**, 1168 (2008)
3. A.H. Jeller *et al.*, *Phytochemistry* **65**, 1977 (2004)