

Desreplicação das espécies *Jatropha multifida* e *Jatropha gossypifolia*(Euphorbiaceae).

Alan Cesar Pilon*(PG); Fausto Carnevale Neto(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: *Jatrophagossypifolia*, *Jatrophamultifida*, técnicas hífenadas, desreplicação, detecção *in silico*.

Introdução

Tradicionalmente, a química de produtos naturais atua de forma importante na descoberta de entidades químicas. Nesse contexto, a biodiversidade Brasileira apresenta uma das maiores fontes de metabólitos com potencial bioativo. Para realizar essa tarefa, o desenvolvimento de metodologias de desreplicação, utilizando técnicas cromatográficas hífenadas é fundamental para evitar o re-isolamento e acelerar o processo da identificação e elucidação estrutural de moléculas promissoras¹⁻².

Neste trabalho, nós analisamos o extrato bruto das folhas de *Jatrophamultifida* *Jatrophagossypifolia*, aplicando técnicas de desreplicação e usando a interface HPLC/HRMS/DAD guiada por dois bioensaios *in vitro*: Atividade antioxidante (DPPH) e a inibição da polimerização da β -hematina bovina.

Resultados e Discussão

O ensaio da atividade antioxidante *in vitro* por DPPH indicou atividade moderada para os extratos bruto de *J. multifida* e *J. gossypifolia*, 30% e 20% de inibição em 60 μ g/mL respectivamente, quando comparados com o padrão rutina, 92%. Para o teste de inibição polimerização da β -hematina bovina não houve resultados significativos tanto para *J. multifida*, 23,2% e *J. gossypifolia*, 2,4%, quando comparados com a quinina (80,2%). Os resultados do CIT (cromatograma de íons totais) para cada extrato bruto foi analisado, processado e interpretado, gerando para as bandas majoritárias, a fórmula molecular de alta resolução. Combinando esses dados com bases de dados de produtos naturais, foi possível detectar, para a *J. gossypifolia*, alguns flavonóides tais como, vitexina(1), isovitexina(2), homoorientina(3) e 3,3',4,4',9,9'-hexahidroxyflign-7-eno(4), um diterpenoidemacrocíclico, 15-O-acetil-japodragona (5) citlaltiriona (6), um diterpeno. Para *J. multifida*, nós detectamos quatro compostos, um derivado de coumarina, propacina (7), os flavonóides 1, 2 e 3; e o cianoglucosídeo, multifidina (8).

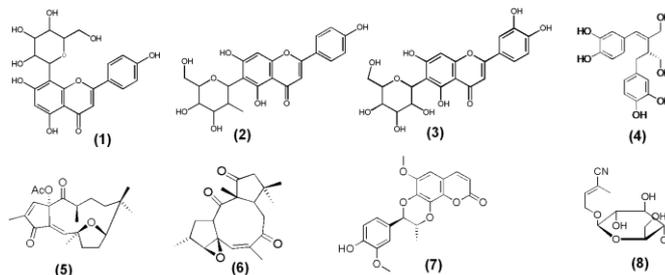


Figura 1. Moléculas detectadas por HPLC-HR-ESI-MS para *Jatrophamultifida* e *J.gossypifolia*.

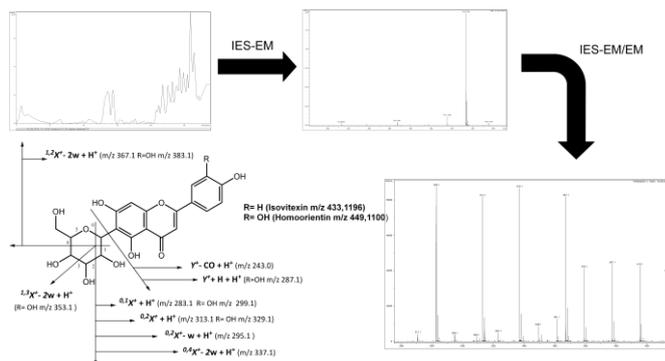


Figura 2. Dados de ESI-MS/MS em modo positivo e propostas de elucidação para isovitexina e homoorientina em extratos brutos de *Jatrophamultifida* e *J. gossypifolia*

Conclusões

O uso das técnicas hífenadas, HPLC/HRMS/DAD junto com os bioensaios *in vitro* realizados neste trabalho, permitiram a detecção de 8 substâncias. Dois flavonóides, vitexina e isovitexina foram descritos em *J. curcase* e *J. heterophylla*, entretanto, a ocorrência do homoorientina nunca foi relatada no gênero *Jatropha*.

Agradecimentos

Ao suporte financeiro FAPESP e CNPq

¹M. Murgu; E. Rodrigues-Filho. *J. Braz. Chem. Soc.* **17**, 1281 (2006).

²Y. Konishiet al., *Analytical Chemistry*. **79**, 1187 (2007).