

Sistematização no isolamento de novas substâncias a partir *Bidens gardneri* Bak. (Asteraceae)

Denise Brentan da Silva (PQ)^{1,2*}, José C. Tomaz (TC)², Edilene D. Rodrigues (TC)³, Norberto P. Lopes (PQ)², Dionéia C. R. de Oliveira (PQ)²

1- Lychnoflora P&D em Produtos Naturais LTDA, Ribeirão Preto-SP, 2- Núcleo de Pesquisa em Produtos Naturais e Sintéticos (NPPNS), FCFRP/USP, Ribeirão Preto-SP, 3- UFMS, Campo Grande-MS. E-mail: denisebrentan@lychnoflora.usp.br

Palavras Chave: Asteraceae, *Bidens gardneri*, LC-DAD-MS, poliacetilenos

Introdução

A espécie *Bidens gardneri* Bak. (Asteraceae), conhecida como picão-do-pantanal, é utilizada popularmente para fins diuréticos, tratamento de icterícia e úlceras crônicas¹, mas não há relatos de estudos químicos envolvendo esta espécie. Convém destacar que no gênero *Bidens* é trivial o isolamento de novas substâncias, inclusive de classes pouco abundantes, como o 3-propil-3-(2,4,5-trimetóxi)benzilóxi-pentan-2,4-dienona² e ácidos cafeicos esterificados com ácido eritrônico³.

O presente trabalho teve como objetivo o estudo da fração acetato de etila oriunda do extrato etanólico das partes aéreas de *B. gardneri* (BgAc) por LC-DAD-MS e LC-DAD-MS/MS (ESI, modos de ionização positiva e negativa). A partir desses dados, foi conduzido o isolamento das substâncias orientado para a obtenção daquelas que não foram identificadas por MS e/ou que são inéditas na literatura segundo as possíveis propostas com base nos perfis de fragmentação.

Resultados e Discussão

A fração BgAc foi analisada por LC-DAD-MS, sendo obtido o cromatograma ilustrado na figura 1. As substâncias relativas aos picos 1, 5 e 8 revelaram espectros de UV muito similares ($\lambda_{\max} \approx 299$ e 325 nm) e perfis de fragmentação correspondentes aos ácidos 5-*O*-cafeoilquínico, 3,5-di-*O*-cafeoilquínico e 4,5-di-*O*-cafeoilquínico⁴, os quais já são extensamente conhecidos e neste estudo não despertaram interesse para o isolamento. As substâncias relativas aos picos 2, 6 e 9 exibiram espectros de UV compatíveis com flavonas e a partir dos perfis de fragmentação dessas substâncias propôs-se que em duas dessas as agliconas são a luteolina e a outra a apigenina, porém todas essas flavonas já foram relatadas anteriormente. Já os picos 10 e 15 exibiram espectros de UV compatíveis com chalconas, mas esta última também revelou uma banda adicional em 312 nm, o que sugere a presença do ácido cumárico. A partir da massa acurada desta última substância se determinou sua a fórmula molecular (C₃₀H₂₈O₁₃).

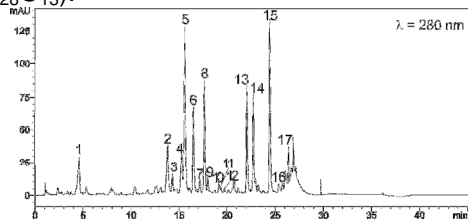
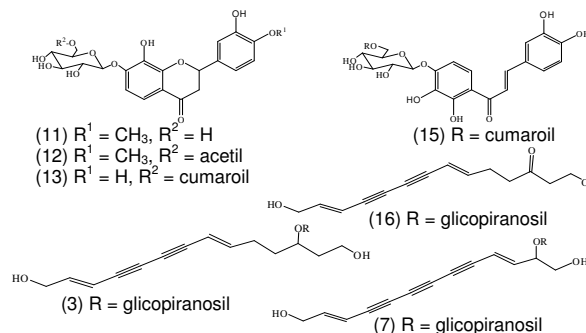


Figura 1. Cromatograma obtido na análise de BgAc. 34ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química



Os picos 3, 7 e 16 revelaram espectros de UV compatíveis com poliacetilenos, porém não houve ionização durante a análise cromatográfica. Então, estes picos cromatográficos foram recolhidos e injetados diretamente no espectrômetro de massas, mas mesmo com elevadas energias de dissociação não foram observados fragmentos e por isso optou-se em isolar tais compostos na tentativa de se obter novas substâncias. Os picos 11, 12 e 13 revelaram espectros de UV compatíveis com flavanonas e a partir das estruturas possíveis, propostas pelos perfis de fragmentação observados, não foram encontrados relatos de seus isolamentos. Portanto, o estudo químico de BgAc foi conduzido em direção ao isolamento desses compostos. Para tal fim, foi realizada uma separação prévia dos compostos por cromatografia em coluna utilizando Sephadex LH-20, porém foi recolhido um reduzido número de frações, as quais foram analisadas por LC-DAD para que fossem selecionadas as frações que continham as substâncias de interesse. Após a purificação das frações selecionadas e posterior análises por RMN foi possível estabelecer a estrutura de sete substâncias, sendo que destas as substâncias 7, 11, 12, 13 e 16 ainda não haviam sido relatadas na literatura.

Conclusões

O estudo prévio da composição de BgAc por LC-DAD-MS foi de extrema relevância para orientar os posteriores procedimentos de fracionamento para a obtenção de novas substâncias. Assim, foi possível obter cinco substâncias que ainda não haviam sido relatadas na literatura e duas que foram apenas relatadas em estudos envolvendo 2 espécies de *Bidens*.

Agradecimentos

Ao CNPq, CAPES e FAPESP.

¹Pott, A.; Pott, V. L. Plantas do Pantanal, EMBRAPA, 1994.

²Kumar, J. K.; Sinha, A. K. *Nat. Prod. Res.* **2003**, 17, 71.

³Ogawa, K.; Sashida, Y. *Phytochemistry* **1992**, 31, 3657.

⁴Clifford, M. N.; Johnston, K. L.; Knight, S.; Kuhnert, N. *J Agric. Food Chem.* **2003**, 51, 2900.