

# Derivados de ácido clorogênico de *Moquiniastrium floribundum* (Asteraceae)

Cinthia Indy Tamayose (PG)<sup>1,2</sup>, Nádia Roque (PQ)<sup>3</sup> e Marcelo J. Pena Ferreira (PQ)<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Biociências, Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasil; <sup>2</sup>Instituto de Química, Universidade de São Paulo; <sup>3</sup>Instituto de Biologia, Universidade Federal da Bahia, Salvador, Brasil. [cinthiatamay@gmail.com](mailto:cinthiatamay@gmail.com)

Palavras Chave: Asteraceae, *Moquiniastrium floribundum*, derivados do ácido clorogênico.

## Abstract

Chlorogenic acid derivatives from *Moquiniastrium floribundum* (Asteraceae). The aim of this work is to report the chemical constituents of polar phases from aerial parts of *Moquiniastrium floribundum* (Cabrera) G. Sancho (Asteraceae).

## Introdução

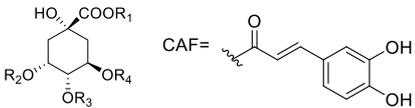
Asteraceae é uma das famílias de maior diversidade entre as Eudicotiledôneas, e além da importância econômica (alimentícia e ornamental), os metabólitos bioativos produzidos são responsáveis pelo elevado emprego medicinal do grupo. *Moquiniastrium* possui 21 espécies sul-americanas entre as quais doze são endêmicas do Brasil<sup>1</sup>. O objetivo desse trabalho foi descrever a composição química das frações polares de *Moquiniastrium floribundum*, uma espécie endêmica do Cerrado.

## Resultados e Discussão

*M. floribundum* foi coletada em Licínio de Almeida, BA em 20/01/2015. As partes aéreas (421,7g) foram extraídas com hexano e o material resultante extraído com metanol, obtendo-se 195,6 g de extrato MeOH. Esse extrato foi ressuspenso em MeOH:H<sub>2</sub>O (1:1 v/v) e submetido a uma partição fornecendo as fases em hexano (4,9 g), em CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> (14,1 g), em AcOEt (15,9 g), em n-BuOH (40,9 g) e hidroalcoólica (HA: 32,1 g), que foram submetidas a análise em CLAE-DAD-UV. As fases AcOEt e HA foram submetidas a um fracionamento por CLAE semi-preparativo obtendo-se, respectivamente, cinco (1-5) e três (6-8) derivados de ácido clorogênico que foram analisados por RMN <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C e RMN 2D. A fase em n-BuOH apresentou as mesmas substâncias presentes nas fases AcOEt e HA. As substâncias isoladas apresentaram um perfil similar entre si na região entre δ 6,2-7,6 com dupletos em δ 7,5-7,6 e δ 6,2-6,4 (J= 15,9Hz) sugerindo a presença de sistemas carboxílicos α,β-insaturados com estereoquímica *trans*, dupletos em δ 7,0-7,1 (J= 1,8Hz), dupletos em δ 6,7-6,8 (J= 8,2Hz) e duplos dupletos em δ 6,8-7,0 (J= 1,8Hz e 8,2Hz) permitindo inferir a presença de grupamentos cafeoila nas estruturas, ainda nos espectros de <sup>1</sup>H pode-se observar sinais na região alifática. Nessa região, os espectros de RMN <sup>13</sup>C apresentaram, em cada substância, dois sinais de

carbonos metilênicos, três sinais de carbonos carbinólicos e um sinal de carbono quartenário oxigenado compatíveis a estrutura do ácido quínico. Tais dados associados indicaram a presença de ácidos cafeoilquínicos. A diferença entre os deslocamentos químicos e comparação com a literatura pode-se identificar os ácidos 4,5-dicafeoilquínico (**1**), 3,5-dicafeoilquínico (**2**) e 3,4-dicafeoilquínico (**3**)<sup>2,3</sup>, os ácidos 3-cafeoilquínico (**4**)<sup>4</sup>, 5-cafeoilquínico (**5**) e 4-cafeoilquínico (**6**)<sup>4</sup>. As substâncias 7 e 8 possuíam um sinal de metoxila cada, que com o auxílio dos mapas de contorno HMBC, foi possível inferir sua ligação ao carbono carboxílico do ácido quínico. Assim, os componentes foram identificados como os ésteres metílicos dos ácidos 3,5-dicafeoilquínico (**7**)<sup>5</sup> e 3,4,5-tricafeoilquínico (**8**)<sup>6</sup>.

**Tabela 1.** Estruturas químicas das substâncias isoladas.



	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	R <sub>4</sub>		R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	R <sub>4</sub>
<b>1</b>	H	H	CAF	CAF	<b>5</b>	H	H	H	CAF
<b>2</b>	H	CAF	H	CAF	<b>6</b>	H	H	CAF	H
<b>3</b>	H	CAF	CAF	H	<b>7</b>	OMe	CAF	H	CAF
<b>4</b>	H	CAF	H	H	<b>8</b>	OMe	CAF	CAF	CAF

## Conclusões

Esse trabalho realizou um estudo fitoquímico inédito das fases polares de *Moquiniastrium floribundum*, o qual permitiu o isolamento e identificação de oito derivados de ácidos clorogênicos.

## Agradecimentos

Ao apoio financeiro da FAPESP através do processo N°: 2014/20932-8 e do CNPq.

<sup>1</sup> Sancho, G.; Funk, V.A.; Roque, N. *Phytotaxa*, 2013, 147, 26.

<sup>2</sup> Islam, M. S.; Yoshimoto, M.; Yahara, S.; Okuno, S.; Ishiguro, K.; Yamakawa, O. *J. Agric. Food Chem.*, 2002, 50, 3718.

<sup>3</sup> Tatefuji, T.; Izumi, N.; Ohta, T.; Arai, S.; Ikeda, M.; Kurimoto, M. *Biol. Pharm. Bull.*, 1996, 19, 966.

<sup>4</sup> Verpoorte, R.; Choi, Y. H.; Kim, H. K.; Linthorst, H. J. M.; Hollander J. G.; Lefeber, A. W. N.; Erkelens, C.; Nuzillard, J. M. *J. Nat. Prod.*, 2006, 69, 742.

<sup>5</sup> Kang, S. S.; Lee, E. J.; Kim, H. P.; Lee, J. H. *Food Chem.*, 2010, 120, 134.

<sup>6</sup> Merfort, I. *Phytochemistry*, 1991, 31, 2111.