

## ANOTAÇÃO DE LACTONAS SESQUITERPÊNICAS EM *BACCHARIS PENTLANDII*

VII Congresso Online Nacional de Química, 7ª edição, de 23/06/2025 a 25/06/2025

ISBN dos Anais: 978-65-5465-148-6

DOI: 10.54265/IDAZ7621

LUCENA; Lorena de Mendonça<sup>1</sup>, FONSECA; Josefa Grazielle Silva<sup>2</sup>, ALVES; Gemima Azevedo<sup>3</sup>, HEIDEN; Gustavo<sup>4</sup>, SONEGO; Jorge Luiz Silveira<sup>5</sup>, CASOTI; Rosana<sup>6</sup>

### RESUMO

A família Asteraceae é uma das mais numerosas do reino vegetal, reunindo cerca de 1.700 gêneros e mais de 24.000 espécies espalhadas por diversos ecossistemas do mundo. Dentro dessa diversidade, destaca-se o gênero *Baccharis*, nativo das Américas e composto por aproximadamente 500 espécies, das quais muitas são conhecidas por suas propriedades medicinais. Apresentam uma rica composição fitoquímica, com predominância de flavonoides, terpenos e derivados fenilpropanóides. *Baccharis pentlandii* é uma espécie pouco conhecida do ponto de vista fitoquímico e farmacológico. Considerando o potencial químico do gênero, estudos que utilizam abordagens analíticas modernas como a cromatografia líquida de ultra-alta eficiência acoplada à espectrometria de massas de alta resolução (UHPLC-HRMS), têm se mostrado eficazes na anotação de metabólitos em espécies vegetais. Nesse contexto, o presente trabalho teve como objetivo investigar o perfil químico de *B. pentlandii* por meio de anotação química usando UHPLC-HRMS. Para isso, amostra de *B. pentlandii* foi coletada e submetida à secagem e pulverização. Em seguida, a extração dos metabólitos secundários foi realizada com 20 mg de material vegetal e 2 mL solução hidroetanólica a 70% (v/v) em banho de ultrassom por 20 min. O extrato resultante foi filtrado e analisado por UHPLC-HRMS (ThermoScientific®). Os dados foram posteriormente processados no Xcalibur e interpretados com base na revisão de literatura científica, considerando fórmula molecular aceita quando o erro foi menor que 4 ppm. A análise permitiu a anotação de classes de compostos como flavonoides, terpenos e derivados fenilpropanóides, frequentemente associados ao gênero *Baccharis*. Além disso, foi identificado um composto pertencente a classe das lactonas sesquiterpênicas (C<sub>15</sub>H<sub>20</sub>O<sub>2</sub>, *m/z* 231.1388), cuja presença não havia sido previamente descrita nem para *B. pentlandii*, nem para o gênero, configurando um achado inédito. Pela anotação química, observou-se a ocorrência de dezessete possíveis estruturas moleculares para a fórmula molecular sugerida, dentre elas, (+)-Alantolactone\_CAS 546-43-0, Alloalantolactone\_CAS 64340-41-6, (+)-Isoalantolactone\_CAS 470-17-7,  $\alpha$ -Cyclocostunolide\_CAS 2221-81-0,  $\beta$ -Cyclocostunolide\_CAS 2221-82-1, (+)-Costunolide\_CAS 553-21-9 e Atractylenolide II\_CAS 73069-14-4. A anotação de lactonas sesquiterpênicas é reforçada por trabalhos anteriores no presente grupo de pesquisa, onde já haviam anotado compostos dessa classe em outras espécies do gênero, como *B. trimera* e *B.*

<sup>1</sup> Universidade Federal de Pernambuco, lorena.mendoncal@ufpe.br

<sup>2</sup> Universidade Federal de Pernambuco, josefa.grazielle@ufpe.br

<sup>3</sup> Universidade Federal de Pernambuco, gemima.alves@ufpe.br

<sup>4</sup> Embrapa Clima Temperado (ECT), gustavo.heiden@embrapa.br

<sup>5</sup> Universidade Federal de Pernambuco, jorge.sonego@ufpe.br

<sup>6</sup> Universidade Federal de Pernambuco, rosana.casoti@ufpe.br

*myriocephala*. A presença dessa classe química em Asteraceae é bem conhecida, como pode ser observado nas espécies como *Centaurea sulphurea* Willd., *Crepis cameroonica*, *Vernonia cinerea*, *Viguiera sylvatica*, *Decachaeta thieleana*, dentre outras espécies desta família. Dessa forma, os resultados obtidos reforçam a presença de classes químicas já esperadas para o gênero *Baccharis*, ao mesmo tempo em que apontam para a diversidade química ainda pouco explorada de *B. pentlandii*, como a presença de lactonas sesquiterpênicas nesta espécie. A realização da anotação química usando UHPLC-HRMS, permite racionalizar o conhecimento sobre o potencial químico e sugerir possíveis alvos farmacológicos desta espécie, evidenciando a importância deste tipo de estudo em espécies vegetais.

**PALAVRAS-CHAVE:** farmacognosia, uhplc-hrms, fitoquímica, metabólitos secundários

<sup>1</sup> Universidade Federal de Pernambuco, lorena.mendoncal@ufpe.br

<sup>2</sup> Universidade Federal de Pernambuco, josefa.graziele@ufpe.br

<sup>3</sup> Universidade Federal de Pernambuco, gemima.alves@ufpe.br

<sup>4</sup> Embrapa Clima Temperado (ECT), gustavo.heiden@embrapa.br

<sup>5</sup> Universidade Federal de Pernambuco, jorge.soneto@ufpe.br

<sup>6</sup> Universidade Federal de Pernambuco, rosana.casoti@ufpe.br