

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

LUCENA; Lorena de Mendonça¹, **FONSECA; Josefa Grazielle Silva**², **ALVES; Gemima Azevedo**³, **HEIDEN; Gustavo**⁴, **SONEGO; Jorge Luiz Silveira**⁵, **CASOTI; Rosana**⁶

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 (C₁₅H₂₀O₂, *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, α -Cyclocostunolide_CAS 2221-81-0, β -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

¹ Universidade Federal de Pernambuco, lorena.mendoncal@ufpe.br

² Universidade Federal de Pernambuco, josefa.graziele@ufpe.br

³ Universidade Federal de Pernambuco, gemima.alves@ufpe.br

⁴ Embrapa Clima Temperado (ECT), gustavo.heiden@embrapa.br

⁵ Universidade Federal de Pernambuco, jorge.sonego@ufpe.br

⁶ Universidade Federal de Pernambuco, rosana.casoti@ufpe.br

anteriores no presente grupo de pesquisa, onde já haviam anotado compostos dessa classe em outras espécies do gênero, como *B. trimera* e *B. 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

¹ Universidade Federal de Pernambuco, lorena.mendoncal@ufpe.br

² Universidade Federal de Pernambuco, josefa.graziele@ufpe.br

³ Universidade Federal de Pernambuco, gemima.alves@ufpe.br

⁴ Embrapa Clima Temperado (ECT), gustavo.heiden@embrapa.br

⁵ Universidade Federal de Pernambuco, jorge.sonego@ufpe.br

⁶ Universidade Federal de Pernambuco, rosana.casoti@ufpe.br