

ESTUDO QUÍMICO DE *CHROMOLAENA HIRSUTA* (ASTERACEAE)

Celso Hernandez Junior (PIBIC/CNPq/FA/UEM)¹, João Victor dos Santos Lemos (PG)¹, Marta Regina Barrotto do Carmo (PQ)², Maria Helena Sarragiotto (Coorientadora)¹, Debora Cristina Baldoqui (Orientadora)¹
e-mail: dcbaldoqui@uem.br

¹Universidade Estadual de Maringá, Centro de Ciências Exatas, Maringá, PR.

²Universidade Estadual de Ponta Grossa/Departamento de Biologia/Ponta Grossa, PR

Química Orgânica/ Química dos Produtos Naturais

Palavras-chave: Fitoquímica, Campos Gerais, Flavonoides.

RESUMO

Este estudo investigou o perfil químico de *Chromolaena hirsuta* (Asteraceae), através de técnicas cromatográficas e ressonância magnética nuclear. Foram isolados sete metabólitos, incluindo esteroides, ácidos fenólicos e flavonoides, cinco deles descritos pela primeira vez na espécie. Os resultados evidenciam a importância da coleta em diferentes regiões e reforçam o potencial fitoquímico de *C. hirsuta*.

INTRODUÇÃO

As plantas são fontes de medicamentos utilizados pela humanidade desde as primeiras civilizações, seja em forma de chás, ingestão direta, aplicações tópicas, entre outras (Berlinck *et al.*, 2017). Elas representam a maior parte da origem da descoberta de novas substâncias, fornecendo compostos inéditos, ou influenciando a síntese de moléculas medicinais a partir de novas estruturas químicas (Croteau *et al.*, 2000).

A família Asteraceae é a maior família de plantas florísticas do mundo, com aproximadamente 1.100 gêneros e 25.000 espécies. Apresentam distribuição cosmopolita. Plantas dessa família são amplamente estudadas devido à sua composição química e atividade biológica, contribuindo para o desenvolvimento de novos fármacos (Verdi *et al.*, 2004).

O gênero *Chromolaena*, pertencente à família Asteraceae, compreende cerca de 165 espécies, distribuídas entre o sul dos Estados Unidos até o sul da Argentina, com maior concentração de espécies no Brasil (RODRÍGUEZ-CABEZA *et al.*, 2014). Cerca de 30 espécies de *Chromolaena* foram quimicamente investigadas, e flavonoides são frequentemente descritos de espécies deste gênero. O Grupo de Síntese e Produtos Naturais (GSPN) da UEM já estudou três espécies de *Chromolaena* coletadas nos Campos Gerais do Paraná, neste estudo está sendo proposto o estudo químico das partes aéreas de *Chromolaena hirsuta*. Embora já

exista na literatura um relato de 8 flavonoides metoxilados de um espécime coletado em Minas Gerais (Taleb-Contini *et al.*, 2003), neste estamos propondo o estudo fitoquímico das partes aéreas de *C. hirsuta* coletadas na região dos Campos Gerais do Paraná.

MATERIAIS E MÉTODOS

Material vegetal

As partes aéreas de *Chromolaena hirsuta* foram coletadas na região dos Campos Gerais do Paraná, pela prof. Dra. Marta Regina Barrotto do Carmo, uma exsicata encontra-se depositada no herbário da UEPG.

Preparação e fracionamento do extrato bruto

O material vegetal foi seco em estufa, a 37 °C, com circulação de ar por 48 horas. Foram triturados com auxílio de um moinho de facas, em seguida submetido à maceração exaustiva com etanol a frio por aproximadamente 7 dias. O solvente orgânico foi evaporado em evaporador rotativo, obtendo-se assim o extrato bruto. O material foi ressuscitado em uma mistura de MeOH/H₂O em proporção 1:1, e então submetido à partição com solventes orgânicos em ordem crescente de polaridade (hexano, acetato de etila e metanol). Foram obtidas então as frações hexânica (9,23 g), acetato de etila (8,55 g) e hidrometanólica (2,9 g).

Estudo da Fração Hexânica

Parte da fração hexânica (9,03 g) foi fracionada em coluna cromatográfica, com sílica gel como fase estacionária, e solventes orgânicos em ordem crescente de polaridade (hexano, acetato de etila e metanol) como fase móvel. Resultando em 118 subfrações, que foram analisadas por cromatografia em camada delgada, e reunidas de acordo com suas semelhanças nas cromatoplasas. A subfração FHex-2 foi enviada para análise por ressonância magnética nuclear, e foram identificados os compostos **CH-1**, **CH-2** e **CH-3**. Foram reunidas as frações FHex-33 até a FHex-53, (0,128 g) e então aplicadas em uma nova coluna cromatográfica, com sílica flash como fase estacionária, e solventes orgânicos em ordem crescente de polaridade (hexano, acetato de etila e metanol) como fase móvel. Resultando em 21 subfrações, que foram analisadas por cromatografia em camada delgada, a subfração FHex-33-3 foi enviada para análise por ressonância magnética nuclear, e foram identificados os compostos **CH-4** e **CH-5**.

Estudo da Fração Acetato

Parte da fração acetato (8,44 g) foi fracionada em coluna cromatográfica, com sephadex como fase estacionária, e metanol como fase móvel. Resultando em 23 subfrações, que foram analisadas por cromatografia em camada delgada. A

subfração FAct-B9 foi enviada para análise por ressonância magnética nuclear, e foi identificado o composto **CH-7**. Foram reunidas as frações FAct-B2-12 até a FAct-B2-14, (0,334 g) e então aplicadas em uma nova coluna cromatográfica, com sílica flash como fase estacionária, e solventes orgânicos em ordem crescente de polaridade (hexano, acetato de etila e metanol) como fase móvel. Resultando em 80 subfrações, que foram analisadas por cromatografia em camada delgada, a subfração FAct-B2-12-9 foi enviada para análise por ressonância magnética nuclear, e foram identificados os compostos **CH-4** e **CH-6**.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

A investigação química das partes aéreas de *C.hirsuta* resultou no isolamento de sete metabólitos. As estruturas foram atribuídas com base em dados de RMN (¹H e ¹³C, COSY, HSQC e HMBC), além de comparação com dados reportados na literatura. Da fração hexânica foram identificados dois esteroides, estigmasterol (**CH-1**) e β-sitosterol (**CH-2**), o ácido *p*-cumárico (**CH-3**), além de dois flavonoides, genkwanina (**CH-4**), rhamnocitrina (**CH-5**). Já da fração acetato de etila foram isolados os flavonoides, genkwanina (**CH-4**) e kumatakenina (**CH-6**), e o ácido 4-hidroxibenzóico (**CH-7**).

Através da análise do espectro de RMN de ^1H de **CH-1** e **CH-2**, observou-se um duplete largo em δ_{H} 5,36 (2H, *dl*, $J = 5,34$ Hz), o qual foi atribuído aos hidrogênios olefínicos H-6, e um multiplete em δ_{H} 3,53 (2H, *m*) atribuído aos hidrogênios oximetínicos H-3 do β -sitosterol e do estigmasterol. A presença do estigmasterol foi proposta pela presença dos sinais em δ_{H} 5,02 (1H, *dd*, $J = 15,0$ e 8,4 Hz) e δ_{H} 5,16 (1H, *dd*, $J = 15,0$ e 8,4 Hz), relativos aos hidrogênios olefínicos H-23 e H-22 da cadeia lateral.

O ácido *p*-cumárico (**CH-3**) foi identificado através da análise do espectro de RMN de ^1H onde foi observado um duplete com sinal em δ_{H} 7,77 (2H, *d*, 8,8 Hz) atribuído aos hidrogênios H-2/H-6 e um duplete com sinal em δ_{H} 6,92 (2H, *d*, 8,8 Hz) atribuído aos hidrogênios H-3/H-5. Os dupletos com sinal em δ_{H} 7,42 (1H, *d*, $J = 15,9$ Hz) e sinal em δ_{H} 6,18 (1H, *d*, $J = 15,9$ Hz) foram atribuídos aos hidrogênios H-7 e H-8, respectivamente.

Os dados de RMN de ^1H e ^{13}C para os flavonoides estão na **figura 1**.

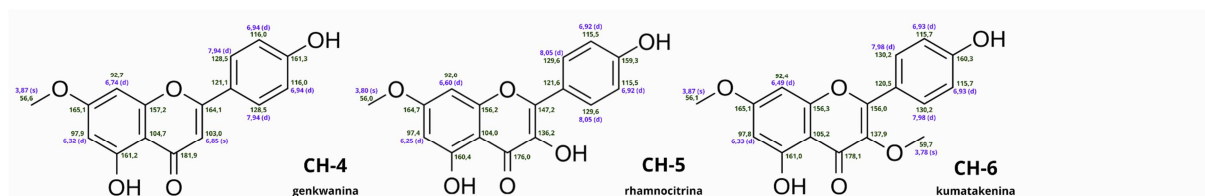


Figura 1: Dados de RMN de ^1H e ^{13}C para os flavonoides isolados de *C. hirsuta*.

Por fim, a substância **CH-7** apresentou no espectro de RMN de ^1H dois dupletos em δ_{H} 7,83 (2H, *d*, 8,8 Hz) e δ_{H} 6,84 (2H, *d*, 8,8 Hz) atribuídos aos hidrogênios equivalentes H-2/H-6 e H-3/H-5, respectivamente, do ácido 4-hidroxibenzóico. A carbonila do grupo ácido foi observada no espectro de RMN de ^{13}C em δ_{H} 171,5.

CONCLUSÕES

Embora *C. hirsuta* conte com estudos fitoquímicos prévios, dos sete metabólitos isolados, cinco estão sendo descritos pela primeira vez na espécie. Esses resultados evidenciam que a coleta de plantas em diferentes regiões pode revelar perfis químicos distintos. Além disso, a presença de flavonoides metoxilados corrobora as características químicas observadas para o gênero *Chromolaena*.

AGRADECIMENTOS

UEM, Grupo de Síntese e Produtos Naturais – GSPN, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – CAPES, e Fundação Araucária.

REFERÊNCIAS

BERLINCK, R. G. S. *et al.* A QUÍMICA DE PRODUTOS NATURAIS DO BRASIL DO SÉCULO XXI. **Química Nova**, São Paulo, v. 40, n. 6, p. 706-710, 17 maio 2017.

Disponível em:

<https://www.scielo.br/j/qn/a/fvKwVcnzGwgXdmcR3xg8t8H/?format=pdf&lang=pt> pt.

Acesso em: 25 ago. 2025.

CROTEAU, R. *et al.* **Biochemistry & Molecular Biology Of Plants**, [s. l], n. 24, p. 1250-1318, 2000. Disponível em:

<https://instruct.uwo.ca/biology/407b/restricted/pdf/Chpt24.pdf>. Acesso em: 25 ago.

2025.

TALEB-CONTINI, S. H. *et al.* Antiprotozoal Effect of Crude Extracts and Flavonoids Isolated from *Chromolaena hirsuta* (Asteraceae). **Phytotherapy Research**, São Paulo, v. 1, n. 18, p. 250-254, 20 ago. 2003. Disponível em:

<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/ptr.1431>. Acesso em: 25 ago. 2025.

VERDI, Luiz Gonzaga. *et al.* GÊNERO *Baccharis* (Asteraceae): ASPECTOS QUÍMICOS, ECONÔMICOS E BIOLÓGICOS. **Química Nova**, Florianópolis, v. 28, n. 1, p. 85-94, 17 maio 2004. Disponível em:

<https://www.scielo.br/j/qn/a/BjvkgWPwc8zHHM5CGB6KNqF/?format=pdf&lang=pt>.

Acesso em: 25 ago. 2025.