

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
NÚCLEO DE PESQUISAS DE PRODUTOS NATURAIS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA DE PRODUTOS NATURAIS

*CORRELAÇÕES QUIMIOSSISTEMÁTICAS
EM SANTALIFLORAE E TÁXONS AFINS:
MÉTODOS CLÁSSICOS E QUIMIOINFORMÁTICA.*

ANA VALÉRIA DE MELLO CRUZ

RIO DE JANEIRO - RJ
2007

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

Cruz, Ana Valéria de Mello
Correlações quimiossistemáticas em Santaliflorae e táxons
afins: métodos clássicos e quimioinformática / Ana Valéria de Mello
Cruz. Rio de Janeiro: UFRJ/ NPPN, 2007.
146 f.:il.

Orientador: Prof. Dra Maria Auxiliadora Coelho Kaplan.
Tese (Doutorado em Química de Produtos Naturais) –
Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, Núcleo
de Pesquisas de Produtos Naturais – NPPN, 2007.
Referências Bibliográficas: f. 135-146.

1. Santaliflorae. 2. Marcadores quimiossistemáticos. 3.
Quinonametídeos. 4. Sistemas especialistas. I. Kaplan. Maria
Auxiliadora Coelho. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro,
Núcleo de Pesquisas de Produtos Naturais, Programa de Pós-
graduação em Química de Produtos Naturais. III. Título.

***CORRELAÇÕES QUIMIOSSISTEMÁTICAS
EM SANTALIFLORAE E TÁXONS AFINS:
MÉTODOS CLÁSSICOS E QUIMIOINFORMÁTICA.***

ANA VALÉRIA DE MELLO CRUZ

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Química de Produtos Naturais da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Ciências.

Orientadores: Prof. Dra Maria Auxiliadora Coelho Kaplan
Prof. Dr. Vicente de Paulo Emerenciano

**RIO DE JANEIRO - RJ
AGOSTO/2007**

**CORRELAÇÕES QUIMIOSSISTEMÁTICAS EM SANTALIFLORAE
E TÁXONS AFINS: MÉTODOS CLÁSSICOS E QUIMIOINFORMÁTICA**

Ana Valéria de Mello Cruz

Tese submetida ao corpo docente do Núcleo de Pesquisas de Produtos Naturais, Universidade Federal do Rio de Janeiro – UFRJ, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Doutor em Ciências.

Tese defendida em 02 de Agosto de 2007.

Aprovada por:

Orientadores: Prof. Dr^a. Maria Auxiliadora Coelho Kaplan – NPPN/UFRJ
(Presidente)

Prof. Dr. Vicente de Paulo Emerenciano – IQ/USP

Examinadores:

Prof. Dr^a Maria Isabel Sampaio dos Santos – FF/UFRJ

Prof. Dr. Marcelo José Pena Ferreira – IQ/USP

Prof. Dr^a Helena Regina Lima Pinto Lima –IB/UFRRJ

Prof. Dr. Alphonse Germaine Albert Charles Kelecom – DB/UFF

Prof. Dr^a Gilda Guimarães Leitão – NPPN/ UFRJ (suplente)

RIO DE JANEIRO
Agosto/2007

DEDICO ESSE TRABALHO À MINHA
FAMÍLIA
E AOS AMIGOS QUE TANTO ME
APOIARAM.

AGRADECIMENTOS

À Prof. Dra Maria Auxiliadora Coelho Kaplan pelo estímulo e carinho durante esses anos que estive sob sua orientação, como estagiária, mestranda e doutoranda. Desejo que nosso convívio possa se estender por muito tempo, pois o seu carinho e exemplo de vida me fortalecem em minha trajetória;

Ao Prof. Dr. Vicente de Paulo Emerenciano por sua acolhida em seu grupo de pesquisa;

Ao Prof. Dr. Marcelo José Pena Ferreira por sua paciência, disponibilidade, atenção e carinho;

À Dr. Karina, pela sua ajuda inestimável e pelos momentos de diversão em São Paulo e ao Marcus Túlio pela sua colaboração;

À Sra Noemi e ao Sr. Benedito pela estadia muito agradável em São Paulo;

À Prof. Dra. Helena Regina, por compartilhar de sua amizade e pelo estímulo na reta final;

À Prof. Dra. Maria Isabel, pelo auxílio prestado em muitas ocasiões;

Aos colegas Rita, Leosvaldo, Daniela, Ana Paula, André e outros pelo convívio;

Aos Professores do NPPN;

À Marinéia, secretária de Pós Graduação do NPPN, por me ajudar em muitos momentos;

Ao Francisco José pelo apoio em muitas horas e ao André e João Henrique pelas horas de lazer;

À CAPES pela bolsa concedida;

À todos aqueles que de alguma maneira contribuíram para a minha caminhada.

RESUMO

CORRELAÇÕES QUIMIOSSISTEMÁTICAS EM SANTALIFLORAE E TÁXONS AFINS: MÉTODOS CLÁSSICOS E QUIMIOINFORMÁTICA.

Ana Valéria de Mello Cruz

Orientadores: Prof. Dra Maria Auxiliadora Coelho Kaplan
Prof. Dr. Vicente de Paulo Emerenciano

Resumo da tese de doutorado submetida ao Programa de Pós-graduação em Química de Produtos Naturais, Núcleo de Pesquisas de Produtos Naturais da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Ciências.

Quimiosistemática é uma ferramenta que vem sendo empregada com sucesso para inferir relações taxonômicas e posicionamentos evolutivos entre os táxons vegetais. A utilização de recursos de informática em Quimiosistemática, através do uso de sistemas especialistas como, por exemplo, o SISTEMAT, vai ao encontro da necessidade de se otimizarem os métodos de armazenamento de dados químicos e a manipulação desses dados em bases matemáticas. Do ponto de vista prático, o estudo químico da superordem Santaliflorae foi o passo inicial para a obtenção de dados relevantes a serem investigados à luz da informática. A superordem Santaliflorae congrega cerca de 4020 espécies distribuídas por três ordens Santalales, Vitales e Celastrales. São plantas cujo hábito varia de arbóreo a arbustivo, abrangendo lianas e trepadeiras e que se estendem por regiões pantropicais e temperadas. A ordem Santalales engloba caracteristicamente espécimes hemiparasitas. O estudo da química flavonoídica e a determinação dos parâmetros químicos de avanço evolutivo para o táxon confirmam resultados obtidos a partir da filogenia molecular, que a família Santalaceae derivou da família Olacaceae e que Viscaceae é o grupo mais evoluído na ordem. A ordem Vitales caracteriza-se por espécimes trepadeiras e lianas. O perfil flavonoídico, bastante rico, abrange antocianinas, taninos condensados, estilbenóides, taninos gálicos e elágicos. A ordem Celastrales abriga a família Celastraceae que produz em grandes quantidades um tipo de nortriterpeno, o quinonametídeo, restrito a esse táxon. Os quinonametídeos são considerados o marcador taxonômico da família Celastraceae, e foram escolhidos como objeto de estudo para a formação de um banco de dados e análise da distribuição dessas substâncias no grupo utilizando o sistema especialista SISTEMAT. Esse estudo permitiu inferir que a família Hippocrateaceae encontra-se melhor alocada como um gênero da família Celastraceae. O posicionamento defendido por Dahlgren da família Rizophoraceae próxima a ordem Celastrales não é consistente com a química micromolecular do táxon.

Palavras-chave: QUIMIOSSISTEMÁTICA, SANTALIFLORAE, QUINONAMETÍDEOS, SISTEMAT

Rio de Janeiro, Agosto/2007.

ABSTRACT

CHEMOSYSTEMATICS CORRELATIONS IN SANTALIFLORAE AND RELATED TAXONS: CLASSIC METHODS AND CHEMOINFORMATIC

Ana Valéria de Mello Cruz

Advisors: Prof. Dra Maria Auxiliadora Coelho Kaplan
Prof. Dr. Vicente de Paulo Emerenciano

Resumo da tese de doutorado submetida ao Programa de Pós-graduação em Química de Produtos Naturais, Núcleo de Pesquisas de Produtos Naturais da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Ciências.

Chemosystematic has been a valuable tool to deduce taxonomic relationships and evolutionary positioning in the Plant Kingdom. Nowadays such parameters are very well explored with computer method assistance. The specialist system SISTEMAT is able to store in a special database all the selected chemical information from a certain taxon, in order to be used in mathematical correlations. Chemical studies of the superorder Santaliflorae provided a suitable molecular data set to be investigated with computer tools. The superorder Santaliflorae encompasses 4020 species distributed in three orders: Santalales, Vitales and Celastrales. These plants have arboreous or shrubby habit with lianas and climbing plants distributed in the pantropical and subtropical regions. The flavonoid feature of Santalales and the calculated flavonoidal evolutionary advancement parameters for this taxon confirmed the molecular phylogeny proposal – the Santalaceae derivation from Olacaceae, besides the positioning of Viscaceae as the most advanced taxon in the order. The chemical profile of Vitales shows clearly the polyphenol metabolism with anthocyanins, condensed tannins, stilbenoids, gallic and ellagic tannins. The family Celastraceae forms the order Celastrales and it is characterized by the production of triterpenes mainly nortriterpene of the quinonemethide type. These metabolites were considered the taxonomic markers for the family. Thus they were chosen to create a special databank to be analysed using the SISTEMAT system. This study allowed to confirm that Hippocrateaceae has its best positioning as a genus within the Celastraceae family. The Dahlgren's translation of the order Rhizophorales from Myrtiflorae to near Celastrales is not consistent with the micromolecular chemistry of the taxon.

Key-words: CHEMOSYSTEMATIC, SANTALIFLORAE, QUINONEMETHIDES, SISTEMAT

RIO DE JANEIRO
AGOSTO/2007

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1. Posicionamento da Superordem Santaliflorae no diagrama de DAHLGREN, 1980.	23
Figura 2. Posicionamento de Rhizophoraceae no diagrama de DAHLGREN, 1980.	24
Figura 3. Posicionamento de Rhizophoraceae no diagrama de DAHLGREN, 1989.	25
Figura 4. Tela principal do DATASIS (FERREIRA, 2003).	35
Figura 5. Aparato de desenho do programa DATASIS.	36
Figura 6. Vetor completo de um triterpeno do tipo quinonametídeo mostrado na tela.	38
Figura 7. Direção das ligações do vetor passos.	39
Figura 8. Tela de leitura de dados do DATASIS.	40
Figura 9. Tela do programa SISTAX.	42
Figura 10. Subestrutura a ser analisada pelo programa SISTAX.	45
Figura 11. Tela do programa SISTAX.	45
Figura 12. Percentagem do número de ocorrências (%NO) de metabólitos especiais majoritários para a ordem Santalales.	51
Figura 13. Correlação dos parâmetros químicos de avanço evolutivo (AEg, AEm, AEd e AEpt) entre si para algumas famílias de Santalales.	52
Figura 14. Correlação dos parâmetros químicos de avanço evolutivo (AEg, AEm, AEta e AEpt) entre si, além da correlação do AEta com os índices de Sporne (IS) e Herbacidade (IH) para algumas famílias de Santalales.	53
Figura 15. Distribuição de espécies da família Olacaceae.	55
Figura 16. Detalhe do ramo de <i>Ximenia americana</i> L..	56
Figura 17. Exemplos de ácidos graxos não saturados de cadeia longa da família Olacaceae.	59
Figura 18 Exemplos de substâncias sulfatadas no gênero <i>Scorodocarpus</i> (Olacaceae).	59
Figura 19. Exemplos de flavonóides de Olacaceae.	60
Figura 20. Exemplo de tanino condensado em Olacaceae.	60

Figura 21. Exemplo de alcalóides em Olacaceae.	61
Figura 22. Exemplo de triterpeno em Olacaceae	61
Figura 23. Percentagem do número de ocorrências (%NO) de metabólitos especiais em Olacaceae.	62
Figura 24. Árvore filogenética baseada em dados morfológicos da família Olacaceae (MALECÓT <i>et al.</i> , 2004). As linhas em preto mostram espécies autotróficas ou com modo de nutrição desconhecido, enquanto que as linhas em verde estão relacionadas com espécies hemiparasitas.	66
Figura 25. Esquema baseado na árvore filogenética da família Olacaceae (Malecót <i>et al.</i> , 2004) mostrando a disposição dos gêneros segundo dados químicos.	67
Figura 26. Distribuição das espécies da família Loranthaceae.	68
Figura 27. Aspectos morfológicos de <i>Loranthus europaeus</i> Jacq. (THOMÉ, 1885).	70
Figura 28. Exemplos de flavonóides presentes em Loranthaceae	72
Figura 29. Exemplos de lactonas norditerpênicas no gênero <i>Ileostylus</i> (Loranthaceae).	72
Figura 30. Exemplos de lactonas sesquiterpênicas no gênero <i>Loranthus</i> (Loranthaceae).	73
Figura 31. Exemplos de triterpenos de Loranthaceae.	73
Figura 32. Exemplo de xantona C-glicosilada no gênero <i>Dendrophthoe</i> .	73
Figura 33. Percentagem do número de ocorrências (%NO) de metabólitos especiais de classes majoritárias em Loranthaceae.	78
Figura 34. Correlação dos parâmetros de avanço evolutivo (AEg, AEm, AEd e AEpt) entre si na família Loranthaceae.	79
Figura 35. Distribuição de espécimes da família Viscaceae.	81
Figura 36. Aspectos morfológicos de <i>Viscum album</i> L. (THOMÉ, 1885).	82
Figura 37. Percentagem do número de ocorrências (%NO) de metabólitos especiais em Viscaceae	84
Figura 38. Percentagem do número de ocorrências (%NO) para os tipos flavonoídicos em Viscaceae.	84
Figura 39. Exemplos de flavonóides de Viscaceae.	88

Figura 40. Correlação entre os diversos parâmetros químicos de avanço evolutivo em Viscaceae.	93
Figura 41. Distribuição das espécies de Santalaceae no mundo.	96
Figura 42. Aspectos morfológicos de <i>Santalum album</i> L. (KOEHLER, 1887).	97
Figura 43. Percentagem do número de ocorrências (%NO) de metabólitos especiais em Santalaceae.	99
Figura 44. Exemplos de metabólitos especiais em Santalaceae.	100
Figura 45. Relações entre as famílias da ordem Santalales Kuijt (1968,1969 <i>apud</i> NICKRENT; FRANCHINA, 1990).	102
Figura 46. Distribuição das espécies da família Opiliaceae.	105
Figura 47. Distribuição das espécies da família Misodendraceae.	106
Figura 48. Distribuição das espécies da família Vitaceae.	108
Figura 49. Aspectos morfológicos de <i>Vitis vinifera</i> L. (THOMÉ, 1885).	109
Figura 50. Distribuição das espécies de Celastraceae.	114
Figura 51. Aspectos anatômicos de <i>Euonymus europaeus</i> L. (THOMÉ, 1885).	115
Figura 52. Exemplos de metabólitos especiais em Celastraceae.	118
Figura 53. Percentagem do número de ocorrências (%NO) para os metabólitos especiais de Celastraceae.	119
Figura 54. Tipos de esqueletos dos triterpenos de Celastraceae.	122
Figura 55. Subestruturas dos triterpenos do tipo quinonametídeo.	128

LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Índices de Herbacidade para diversos grupos vegetais.	29
Tabela 2. Bancos de dados distribuídos e interligados do SISTEMAT (FERREIRA, 2003).	41
Tabela 3. Códigos dos grupamentos químicos utilizados na codificação do SISTAX.	43
Tabela 4. Código de subestruturas utilizado pelo programa SISTAX.	44
Tabela 5. Códigos das ligações químicas utilizadas na codificação do SIXTAX.	44
Tabela 6. Número de espécies hospedeiras parasitadas por algumas espécies da família Loranthaceae e Viscaceae (adaptada de DEVKOTA, 2005).	48
Tabela 7. Classificação intrafamiliar de Olacaceae segundo ENGLER (1897) com modificações e adições de SLEUMER (1984b) e BRETELER (1996).	57
Tabela 8. Ácidos graxos não saturados de cadeia longa presentes na família Olacaceae.	63
Tabela 9. Tribos e gêneros da família Loranthaceae <i>sensu</i> TAKHTAJAN (1997).	69
Tabela 10. Flavonóides encontrados na família Loranthaceae.	74
Tabela 11. Distribuição dos gêneros nas tribos da família Viscaceae (TAKHTAJAN, 1997).	83
Tabela 12. Flavonóis em Viscaceae.	86
Tabela 13. Flavonas em Viscaceae.	89
Tabela 14. Flavanonas e chalconas em Viscaceae.	89
Tabela 15. Peptídeos tóxicos em Viscaceae.	92
Tabela 16. Tribos e gêneros de Santalaceae <i>sensu</i> STAUFFER, 1969.	98
Tabela 17. Relação dos gêneros de Vitaceae <i>sensu</i> TAKHTAJAN, 1997.	110
Tabela 18. Subfamílias e tribos de Celastraceae <i>sensu strictus</i> (Loesener, 1942)	116
Tabela 19. Subfamílias e tribos de Hippocrateaceae (HALLÉ, 1962).	116
Tabela 20. Subfamília Hippocrateoideae e suas tribos (HALLÉ, 1986).	117

Tabela 21. Esqueletos dos triterpenos de Celastraceae.	121
Tabela 22. Número de ocorrências por gênero dos tipos de esqueletos mais significativos em Celastraceae.	124
Tabela 23. Distribuição por tribos e subfamílias dos esqueletos mais significativos de Celastraceae.	126

ABREVIATURAS EM ORDEM ALFABÉTICA

AE_d	Avanço evolutivo referente à desproteção
AE_g	Avanço evolutivo referente à glicosilação
AE_m	Avanço evolutivo referente à metilação
AE_o	Avanço evolutivo referente à oxidação
AE_{tA}	Avanço evolutivo referente à transformação do anel A
AE_{pt}	Avanço evolutivo referente à proteção total
AGCL	Ácidos graxos de cadeia longa
ALC	Alcalóides
APG	Angiosperm Phylogeny Group
CAS	Chemical Abstract System
Esq	Esqueleto
fo/ fl	Razão flavona – flavonol
Id	Índice de desproteção
Ig	Índice de glicosilação
IH	Índice de herbacidade
Io	Índice de oxidação
IS	Índice de Sporne
It_A	Índice de transformação do anel A
NO	Número de ocorrências
%NO	Porcentagem do número de ocorrências

SUMARIO

INTRODUÇÃO

Quimiosistemática	17
Superordem Santaliflorae	21
Família Rhizophoraceae <i>sensu</i> Dahlgren, 1980; 1989	21
Objetivos	26

PARTE EXPERIMENTAL

Quimiosistemática da superordem Santaliflorae	28
Índice Morfológico - Químico	29
Índice Morfológico	30
Índices Químicos	30
Quimiosistemática da família Rhizophoraceae	33
Abordagem filogenética dos dados químicos obtidos para Santaliflorae	33
Elaboração do banco de dados dos triterpenos da família Celastraceae utilizando o sistema especialista SISTEMAT	34
Programa Sistax	41

RESULTADOS E DISCUSSAO

Superordem Santaliflorae	47
Ordem Santales	47
Olacaceae	55
Loranthaceae	68
Viscaceae	81
Santalaceae	96
Opiliaceae	105
Misodendraceae	106
Ordem Vitales	108
Vitaceae	108
Ordem Celastrales	113
Celastraceae	114
Considerações Quimiosistemáticas da família Celastraceae	119
Análise do Posicionamento de Rhizophoraceae <i>sensu</i> Dahlgren, 1989	129

CONCLUSÕES	130
-------------------	-----

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	135
-----------------------------------	-----

INTRODUÇÃO

QUIMIOSSISTEMÁTICA

Quimiosistemática Micromolecular Vegetal é uma disciplina que abrange áreas como Química Micromolecular, Biologia Geral, Botânica, Evolução, Taxonomia e Ecologia. A partir de análises de dados micromoleculares e morfológicos das plantas podem-se inferir tendências evolutivas para um determinado táxon bem como prever, a partir da sua posição no sistema de classificação e de sua localização ecogeográfica, a potencialidade de uma espécie como fonte de produtos naturais biologicamente ativos (GOTTLIEB, 1982).

Há cerca de duzentos anos, os taxonomistas já haviam reconhecido o potencial valor do uso de dados químicos em sistemas de classificação botânica. Lindley (1830, *apud* HARBORNE, 2000) comprovava na prática as vantagens do emprego de dados químicos em taxonomia ao separar a tribo Amygdaleae da tribo Chrysobalanaeae utilizando-se de glicosídeos cardiotônicos.

Por outro lado, havia um certo ceticismo quanto à utilização de dados micromoleculares como um critério taxonômico. Heslop-Harrison (1963, *apud* HARBORNE; TURNER, 1984) argumentava que nada havia de especial na utilização desses dados e que “as vias biossintéticas que levam a determinados constituintes químicos são expressões do genoma assim como o são os caracteres morfológicos”.

A partir da metade do século XX, com o advento de técnicas modernas de prospecção química assim como de identificação de metabólitos especiais em plantas, a Quimiosistemática estabeleceu-se como um paradigma a ser seguido por quem desejasse ampliar os limites do conhecimento taxonômico. Assim,

novos sistemas de classificação surgiram com base na distribuição de metabólitos especiais produzidos pelas plantas, por exemplo, os sistemas de Thorne e Dahlgren (WINK, 2003).

O sistema formulado por DAHLGREN (1980) permitiu que padrões de distribuição de dados químicos fossem inseridos em um arcabouço taxonômico filogenético. Tal sistema vem sendo utilizado por diversos grupos de pesquisa desde então.

A noção de presença ou ausência de metabólitos especiais em determinado táxon, contudo, deve ser vista com uma certa reserva. Deve-se ter em mente que a presença desses metabólitos só vai configurar um quadro fidedigno das afinidades taxonômicas quando “a categoria biossintética à qual o metabólito pertence for adequadamente diversificada no táxon” (GOTTLIEB *et al.*, 1996). Tal diversificação é expressa pela freqüência de aparecimento dessas micromoléculas no táxon, o que em outras palavras, corresponde ao número de ocorrências (NO) para a classe de metabólitos.

Por sua vez, o critério de ausência pode fornecer pistas sobre tendências evolutivas de vários táxons. Por exemplo, táxons pertencentes ao eixo diagonal Myrtiflorae-Malviflorae do diagrama de Dahlgren produzem micromoléculas de estruturas raramente diversificadas devido à presença concomitante de taninos gálicos e elágicos (KAPLAN; GOTTLIEB, 1990). Assim plantas taníferas podem abrigar um número bastante reduzido de diferentes grupos biogenéticos.

A Quimiosistemática constitui uma ferramenta de racionalização de tendências evolutivas bem como de mapeamento da biodiversidade e de busca orientada de princípios bioativos.

Uma outra maneira de se abordar o uso de dados micromoleculares para fins de classificação botânica envolve análise cladística. Jeffrey (1995, *apud* BARKMAN, 2001) aponta para a necessidade da análise cladística de dados químicos, que segundo ele, são pouco aproveitados. Em outras investigações, os pesquisadores relacionam os dados químicos com padrões de variações de DNA, por exemplo, provenientes de análises filogenéticas de outra fonte. Nesse caso, os resultados obtidos são empregados para proposta de comparação com os dados químicos selecionados e refletem congruências existentes entre os dados químicos e filogenéticos (BARKMAN, 2001).

Recentemente a utilização de computadores na área de química orgânica sofreu um avanço expressivo, principalmente em questões de elucidação estrutural. Na área da química de Produtos Naturais, o projeto DENDRAL, um sistema especialista que abrange vários programas, foi um dos primeiros a demonstrar a potencialidade do uso de métodos computacionais na análise de dados experimentais (DJERASSI *et al.*, 1982).

Um desses programas, o GENOA, gera diversos isômeros estruturais a partir de uma dada fórmula molecular e freqüentemente está associado a outros programas que perfazem de maneira automática a interpretação de espectros e avaliação estrutural. O programa consiste em definir uma série de subestruturas levando em consideração algumas informações químicas, como os dados de ^{13}C RMN e, a partir daí impor condições ao aparecimento dessas subestruturas, como por exemplo, o número de ocorrências das mesmas em um determinado caso. Tal procedimento explora uma ampla gama de possíveis soluções que o pesquisador

por si só, sem o auxílio do computador, não teria condições de conseguir (CARHART *et al.*, 1981).

O desenvolvimento de outros programas que atuam na interface químico orgânico-computador ajuda o pesquisador a relacionar dados químicos com outros tipos de informações não químicas. O SISTEMAT é um sistema especialista desenvolvido no Brasil (GASTMANS *et al.*, 1990a, 1990b; EMERENCIANO *et al.*, 1993) com o intuito de ajudar no processo de elucidação estrutural além de permitir a correlação entre características estruturais e dados botânicos, o que o distingue de outros sistemas especialistas, como o DENDRAL.

No SISTEMAT as informações botânicas (família, gênero e espécie) e as ocorrências das substâncias presentes no banco de dados, também são armazenadas, o que o torna uma ferramenta de valor inestimável para estudos de Quimiosistemática (ALVARENGA *et al.*, 2001; ALVARENGA *et al.*, 2005).

Outras vantagens inerentes ao sistema são a possibilidade de compactação de informações armazenando uma grande quantidade de dados sem ocupar muito espaço no sistema e a utilização de fórmula estrutural codificada, com a qual pode-se obter informações químicas de uma dada substância. Assim, vários dados podem ser armazenados no SISTEMAT tais como a representação da molécula, o nome trivial, a classe química, o tipo de esqueleto, as referências, os dados botânicos, os dados físico-químicos e outros.

Um dos aspectos mais interessantes da obtenção desse banco de dados é a possibilidade de inferir que tipos de esqueletos poderão ocorrer em um determinado nível hierárquico (FERREIRA *et al.*, 2003), o que permite análises filogenéticas mais acuradas e uma busca racional por substâncias bioativas.

SUPERORDEM SANTALIFLORAE

A superordem Santaliflorae (*sensu* Dahlgren 1980) engloba as ordens Santalales, Vitales e Celastrales com cerca de 219 gêneros e 4020 espécies de distribuição pantropical e temperada e hábito que se estende do arbóreo ao herbáceo. Apresenta várias espécies de valor medicinal como a espinheira santa (*Maytenus ilicifolia* L.), a Muirapuama (*Ptychopetalum olacoides* Benth.), e outras de grande valor comercial como o sândalo (*Santalum album* L.) e a uva (*Vitis vinifera* L.). O perfil químico da superordem é caracterizado, principalmente pela presença de flavonóides, ácidos graxos poliacetilênicos, triterpenóides e mono- e sesquiterpenos do óleo essencial. Ocorrem ainda, sesquiterpenos, substâncias sulfuradas, alcalóides, tioninas e estilbenóides.

Em 1989, Dahlgren elabora um novo diagrama de classificação das Angiospermas tomando como base o diagrama de 1980. Sendo assim, no novo diagrama, a Superordem Santaliflorae é desmembrada originando duas novas superordens, Santalanae e Vitanae (Figura 1). Além disso, a ordem Celastrales passa a fazer parte da superordem Rutanae. A superordem Santalanae abrange a ordem Santalales enquanto que Vitanae engloba a ordem Vitales.

FAMÍLIA RHIZOPHORACEAE SENSU DAHLGREN, 1980; 1989.

A família Rhizophoraceae (*sensu* Dahlgren, 1980) (Figura 2) pertence a superordem Myrtiflorae, ordem Rhizophorales, onde constitui a única família do táxon sugerindo afinidades com as ordens Myrtales e Haloragales. A família compreende 15 gêneros e abrange cerca de 140 espécies de hábito lenhoso e

distribuição pantropical, principalmente no Sudeste da Ásia. São conhecidas como plantas de mangue em referência às espécies da tribo *Rhizophorae*.

O posicionamento taxonômico da família ao longo do tempo tem sido objeto de discussão. Cronquist (1968, *apud* CRUZ, 2002) e Thorne (1968, 1983, *apud* CRUZ, 2002) colocaram Rhizophoraceae na ordem Cornales. Entretanto, Cronquist em 1981 posiciona Rhizophoraceae em sua própria ordem Rhizophorales em Rosidae e Thorne em 1992 a coloca na superordem Geraniales. Takhtajan (1997, *apud* CRUZ, 2002) também considera Rhizophoraceae em sua própria ordem, Rhizophorales, superordem Rhizophorales.

Posteriormente, Dahlgren (1989) refez seu sistema de classificação e a partir de estudos morfológicos, anatômicos, palinológicos e químicos, posicionou Rhizophoraceae em uma ordem própria, Rhizophorales, na superordem Rutales, próximo à ordem Celastrales (Figura 3).

Do ponto de vista químico, Rhizophoraceae caracteriza-se pela presença de substâncias sulfatadas, taninos condensados, alcalóides pirrolizidínicos, pirrolizidínicos, tropânicos, flavonóides, triterpenóides e diterpenóides do tipo kaurano, pimarano, beyerano e secolabdano.

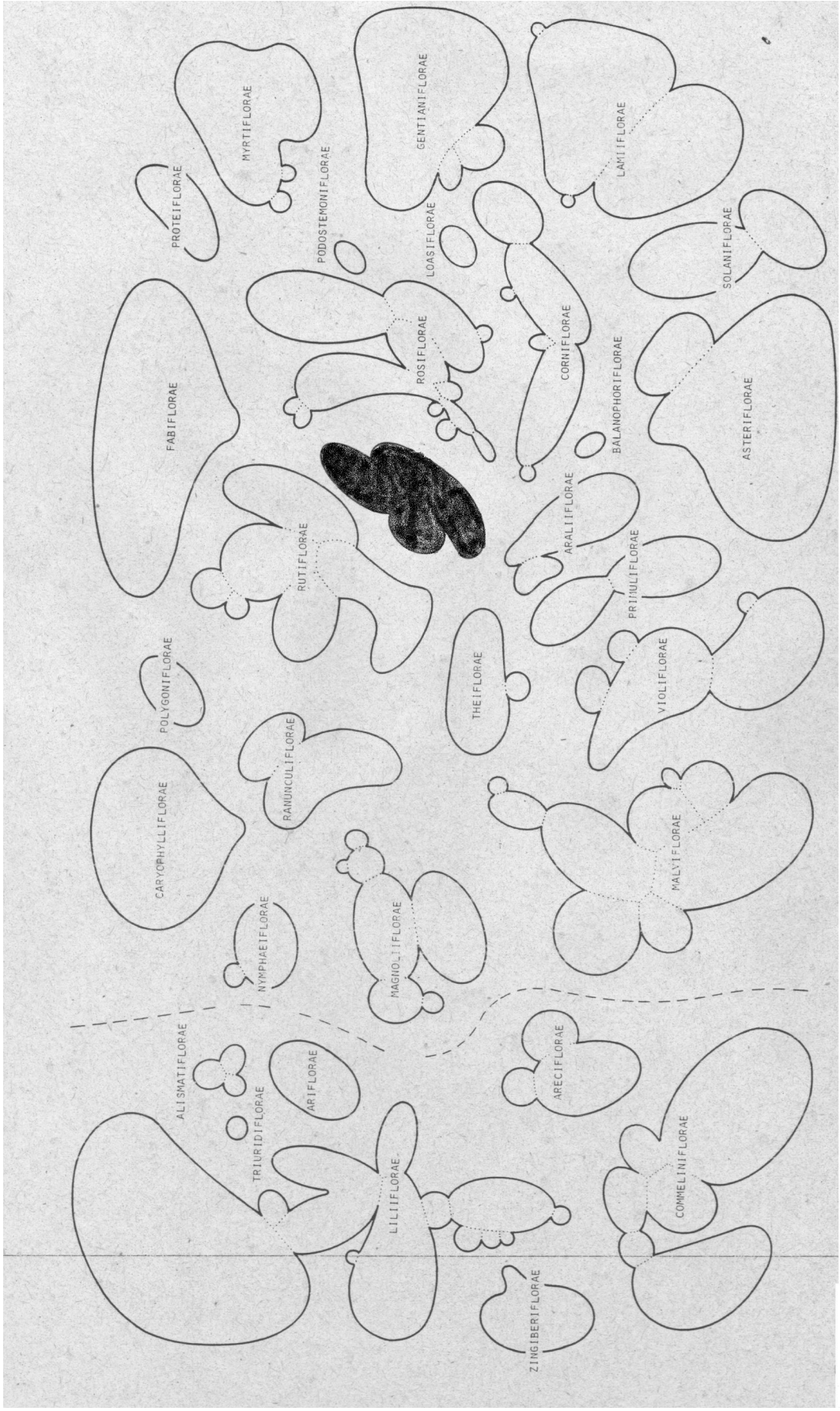


Figura 1. Posicionamento da Superordem Sanraliflorae no diagrama de Dahlgren, 1980.

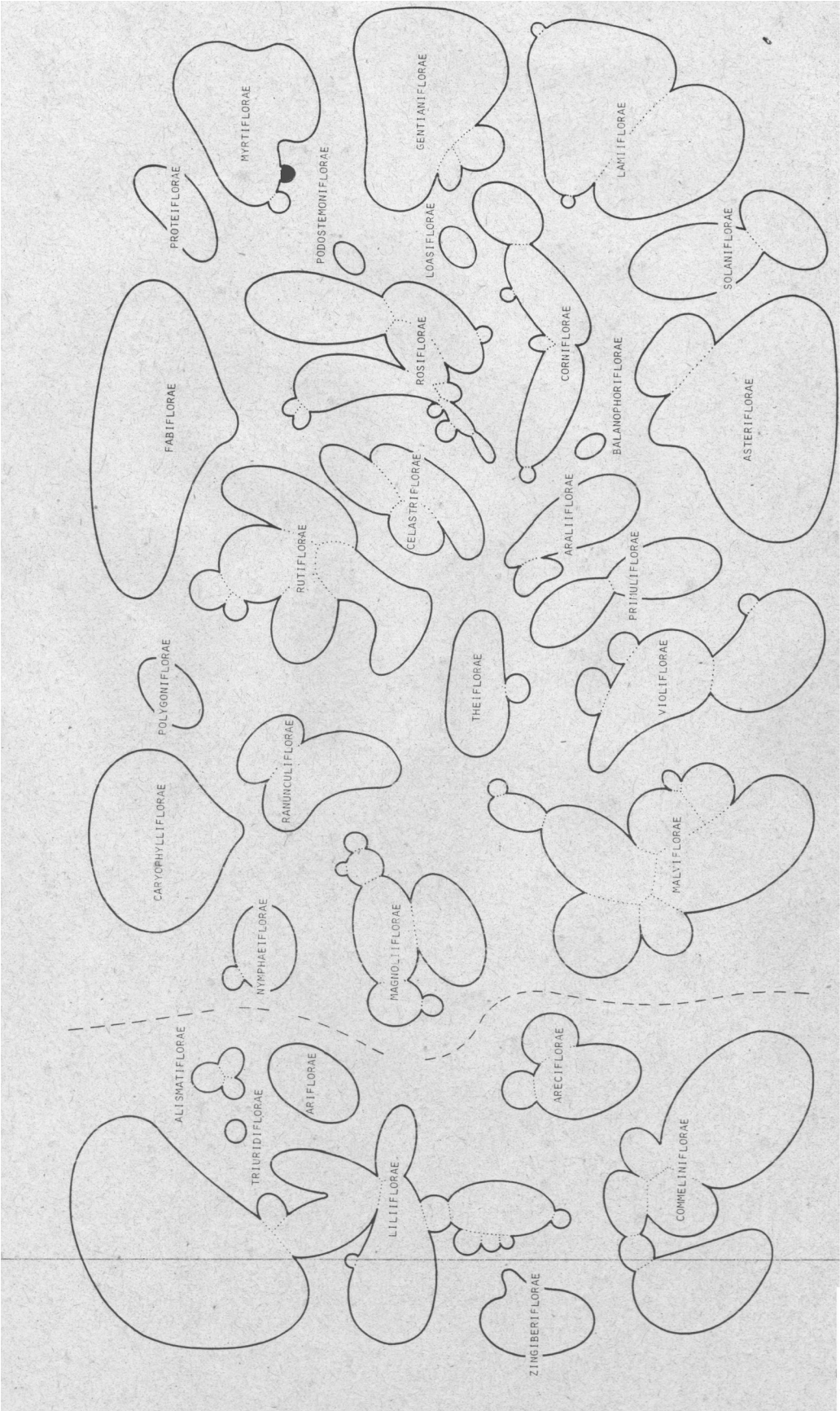


Figura 2. Posicionamento de Rhizophoraceae no diagrama de Dahlgren, 1980.

OBJETIVOS

Utilizar metodologias diversas como a Quimiosistemática Vegetal Micromolecular e a Informática para inferir relações de afinidades e tendências evolutivas entre os *taxa* de Santaliflorae a partir de correlações de parâmetros químicos e filogenéticos.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS:

- Realizar um levantamento do acervo químico da superordem Santaliflorae;
- Estimar o universo de dados químicos através da determinação do número de ocorrências das diversas classes biossintéticas, revelando o perfil químico para os vários *taxa*;
- Inferir tendências evolutivas a partir da determinação dos parâmetros químicos de avanço evolutivo para os *taxa* estudados;
- Criar uma base de dados dos triterpenos de Celastraceae a partir do programa DATASIS do sistema especialista SISTEMAT;
- Analisar os dados armazenados obtidos utilizando o programa SISTAX do sistema especialista SISTEMAT a fim de relacionar dados botânicos com dados químicos;
- Avaliar o posicionamento dos gêneros da família Hippocrateaceae com relação à família Celastraceae;
- Analisar o posicionamento de Rhizophoraceae segundo o sistema de classificação de Dahlgren (1989).

PARTE EXPERIMENTAL

QUIMIOSSISTEMÁTICA DA SUPERORDEM SANTALIFLORAE

O levantamento bibliográfico realizado no CAS abrangendo os índices coletivos do período de 1907 a 2007 e também no software de busca denominado de SciFinder Scholar, forneceu informações de caráter químico referentes às famílias e aos gêneros da superordem Santaliflorae. Para propostas de informações botânicas foram utilizados os sistemas de classificação de Dahlgren (1980) para Angiospermae até nível de família e de Brummit (1992) até nível genérico. O Subject Index (SI) ou Índice de assuntos foi o ponto de partida para a obtenção dos números dos volumes e de registro onde se encontram os resumos, o nome dos autores, além dos nomes das revistas onde os trabalhos foram publicados. Posteriormente, foram realizadas consultas às revistas especializadas - impressa ou "online" - onde se encontram a íntegra dos artigos científicos. Por fim, os dados obtidos foram tabelados com o propósito de identificar os padrões de substituição dos diferentes grupamentos químicos das diversas classes biogenéticas.

Procedeu-se então à determinação e cálculo dos vários parâmetros quimiossistemáticos. O índice químico-morfológico ou Índice de herbacidade (IH) juntamente com o índice morfológico ou Índice de Sporne (IS) foram obtidos a partir do tabelamento feito por Gottlieb *et al.* (1996) para as famílias de Angiospermae. Para os representantes flavonoídicos, foram calculados ainda os índices químicos de glicosilação (I_g), de metilação (I_m), de desproteção (I_d) e de transformação do anel A (I_{t_A}). A partir dos índices químicos pode-se calcular os diversos parâmetros de avanço evolutivo referentes a glicosilação (AE_g),

metilação (AE_m), desproteção (AE_d) e transformação do anel A (AE_{tA}) bem como a razão fo/fl para os diversos *taxa*.

Para os representantes triterpenoídicos dos gêneros da família Celastraceae foram calculados: o índice de oxidação (Io) e o avanço evolutivo em relação à oxidação (AEo)

ÍNDICE MORFOLÓGICO-QUÍMICO

O Índice de Herbacidade caracteriza-se por atribuir valores entre 1 e 100 ao hábito predominante das espécies dos diversos *taxa*. Sendo assim, o valor 100 é atribuído àqueles *taxa* que apresentam somente espécimes herbáceos, e o valor 1 significa que há somente espécimes arbóreas no táxon em estudo. Valores intermediários advêm da predominância nos *taxa* de espécimes arbóreas, arbustivas ou herbáceas (GOTTLIEB *et al.*, 1996) (Tabela 1).

Tabela 1. Índices de Herbacidade para diversos grupos vegetais.

TIPOS DE HÁBITO	IH
Árboreo	1,0
Árboreo predominando sobre arbustivo	12,5
Árboreo e arbustivo	25,0
Arbustivo predominando sobre arbóreo	37,5
Arbustivo	50,0
Arbustivo predominando sobre herbáceo	62,5
Arbustivo e herbáceo	75,0
Herbáceo predominando sobre arbustivo	87,5
Herbáceo	100,0

ÍNDICE MORFOLÓGICO

O Índice de Sporne (IS), criado por Sporne (1980), é um índice percentual de avanço evolutivo baseado em trinta caracteres primitivos, sendo que vinte oito desses são morfológicos e dois químicos (GOTTLIEB *et al.*, 1996).

ÍNDICES QUÍMICOS

NÚMERO DE OCORRÊNCIAS (NO)

É a freqüência com que substâncias de uma classe química específica são produzidas por determinado táxon. Tal parâmetro reflete a importância de uma categoria metabólica para o táxon em estudo.

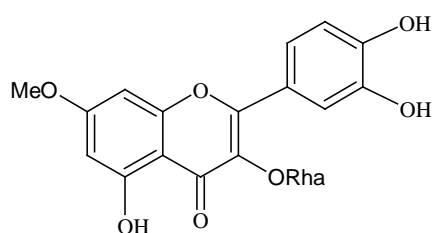
PERCENTAGEM DE NÚMERO DE OCORRÊNCIAS (%NO)

Com o intuito de normalizar os dados recorreu-se ao cálculo de percentagem de número de ocorrências, onde o somatório do número de ocorrências de uma determinada classe biogenética multiplicado por 100, é dividido pelo total de ocorrências registradas.

ÍNDICE DE PROTEÇÃO DE HIDROXILAS FLAVONOÍDICAS (Im; Ig)

As hidroxilas dos flavonóides podem estar protegidas por grupos metila e/ou glicosila através de eterificação com grupos metila provenientes de 5-adenosilmetionina, a metilação, e/ou através de reações de acetalização com açúcares, a glicosilação (PUGIALLI *et al.*, 1993). A dimensão dessa proteção é expressa por índices químicos denominados de índice de proteção por metilação (Im) e de índice de proteção por glicosilação (Ig). Eles são calculados a partir da soma do número de grupos hidroxilas protegidos por grupos metila e/ou grupos glicosila, dividida pelo número de grupos oxílicos na estrutura flavonoídica.

Exemplo:



3-O-ramnosil-ramnetina

$$I_m: 1/5 = 0,2$$

$$I_g: 1/5 = 0,2$$

AVANÇO EVOLUTIVO REFERENTE À PROTEÇÃO DE HIDROXILAS FLAVONOÍDICAS (AE_m ; AE_g)

O parâmetro de Avanço Evolutivo de Proteção de Hidroxilas Flavonoídicas através de metilação (AE_m) e de glicosilação (AE_g) é determinado pelo somatório dos respectivos índices de proteção das substâncias encontradas no táxon em estudo (gênero, família, ordem e superordem), dividido pelo número de ocorrências.

$$AE_M = \Sigma I_m / NO$$

$$AE_G = \Sigma I_g / NO$$

ÍNDICE DE DESPROTEÇÃO (I_d)

É o parâmetro quimiosistemático que indica o grau de desproteção das hidroxilas flavonoídicas de cada substância encontrada. Seu cálculo consiste na razão entre o número de hidroxilas livres da estrutura em questão e o número total dos grupos oxílicos presentes, na molécula.

AVANÇO EVOLUTIVO REFERENTE A DESPROTEÇÃO DAS HIDROXILAS FLAVONOÍDICAS (AE_d)

É o parâmetro químico determinado pelo somatório dos índices de desproteção das substâncias encontradas no táxon em estudo (gênero, família, ordem e superordem) dividido pelo número de ocorrências.

$$AE_D = \Sigma I_d / NO$$

ÍNDICE DE TRANSFORMAÇÃO DO ANEL A DOS FLAVONÓIDES (IT_A)

A estrutura flavonoídica caracteristicamente apresenta um padrão de oxigenação nas posições 5 e 7 (anel A). Tal padrão advém da via biossintética mista do acetato-chiquimato. Para o cálculo do índice em questão atribui-se 1 ponto para cada modificação ocorrida no anel A, como a perda de hidroxilas em 5 e/ou 7 e a adição de grupos oxílicos em 6 e/ou 8.

AVANÇO EVOLUTIVO REFERENTE À TRANSFORMAÇÃO DO ANEL A (AE_{TA})

É obtido a partir da média ponderada dos índices de transformação do anel A dos flavonóides considerados nos *taxa* em estudo.

RAZÃO FLAVONA/FLAVONOL (Fo/FL)

É calculada a partir da divisão do número de ocorrências de flavonas pelo número de ocorrências de flavonóis para os *taxa* em estudo.

ÍNDICE DE OXIDAÇÃO (IO)

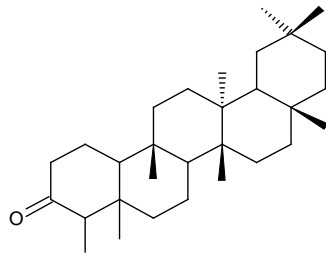
Está relacionado com o nível de oxidação de uma molécula e o seu cálculo é feito a partir da soma de 1 ponto para cada ligação carbono-heteroátomo e diminuição de 1 ponto para cada ligação carbono-hidrogênio. O resultado obtido é dividido pelo número de átomos de carbono da molécula.

Exemplo:

$$Io = x - h / n \quad : \quad x = \text{número de ligação carbono-heteroátomo}$$

$$h = \text{número de ligação carbono-hidrogênio}$$

$$n = \text{número de átomos de carbono}$$



Friedelina

$$I_o = 2 - 50 / 30 = -1,60$$

AVANÇO EVOLUTIVO REFERENTE À OXIDAÇÃO (AE_o)

O valor obtido pelo somatório dos índices de oxidação de cada substância presente no táxon em estudo (gênero, família, ordem ou superordem) é dividido pelo número de ocorrências.

$$AE_o = \Sigma I_o / NO$$

QUIMIOSSISTEMÁTICA DA FAMÍLIA RHIZOPHORACEAE

Foi realizada uma busca por dados químicos no CAS e no Sci Finder Scholar para os anos de 2003 a 2007, a fim de atualizar os dados da família Rhizophoraceae, ordem Rhizophorales, superordem Myrtiflorae *sensu* DAHLGREN, 1980. Posteriormente procedeu-se ao tabelamento desses novos dados de acordo com as classes biogenéticas encontradas e a análise desses dados à luz da teoria quimiossistemática.

ABORDAGEM FILOGENÉTICA DOS DADOS QUÍMICOS OBTIDOS PARA SANTALIFLORAE

Os dados químicos obtidos e tabelados de algumas classes metabólicas foram comparados com os resultados provenientes de análises filogenéticas oriundas de abordagens metodológicas baseadas em caracteres morfológicos

e/ou caracteres macromoleculares para os diversos *taxa* considerados. Essa abordagem técnica leva em conta os padrões de similaridade química verificados entre os *taxa*.

ELABORAÇÃO DO BANCO DE DADOS DOS TRITERPENOS DA FAMÍLIA CELASTRACEAE, UTILIZANDO O SISTEMA ESPECIALISTA SISTEMAT

O sistema especialista SISTEMAT congrega uma série de programas que permite a criação de bancos de dados. Um desses programas, o DATASIS gera uma codificação automática da substância quando o desenho da estrutura molecular da mesma é inserido na tela do computador. Inicialmente é criado e nomeado um banco fonte onde as estruturas das substâncias bem como informações acerca da botânica, da química, da físico-química e outras são armazenadas. Posteriormente são requisitados o nome do arquivo de esqueletos e o nome do arquivo de substâncias.

Um arquivo de esqueleto contém gravados todos os tipos de esqueleto, por exemplo, triterpenos, obtidos da literatura. Da mesma forma o é para o arquivo de substâncias. A presença desses arquivos facilita a inserção e manipulação das entradas posteriores, pois os esqueletos bases das substâncias já se encontram desenhados. A partir daí, a tela principal do programa é mostrada (Figura 4).

Na tela principal, há opções relacionadas com a entrada e saída do sistema operacional e outras que dizem respeito à entrada de novas substâncias, à inserção de dados botânicos, físico-químicos e outros. A condição para que se processe a entrada de uma nova substância no banco de dados é que seja fornecido um nome trivial para essa substância.



Figura 4. Tela principal do DATASIS (FERREIRA, 2003).

Por sua vez, o sistema irá verificar a partir desse nome se a substância já existe. Caso não haja condição de se estabelecer um nome trivial, o sistema ainda assim poderá reconhecer a substância a partir de uma codificação numérica.

Se a substância não existir no banco de dados é designado um número de ficha para essa nova entrada e a tela de desenho é apresentada (Figura 4). O desenho feito com o cursor utiliza uma simbologia particular, vista à direita da tela, para representar ligações simples e múltiplas, tipos de átomos e estereoquímica. (Figura 5). A partir do desenho da substância, o programa elabora a codificação dessa estrutura, pois o computador necessita reconhecer a mesma a partir de uma expressão matemática.

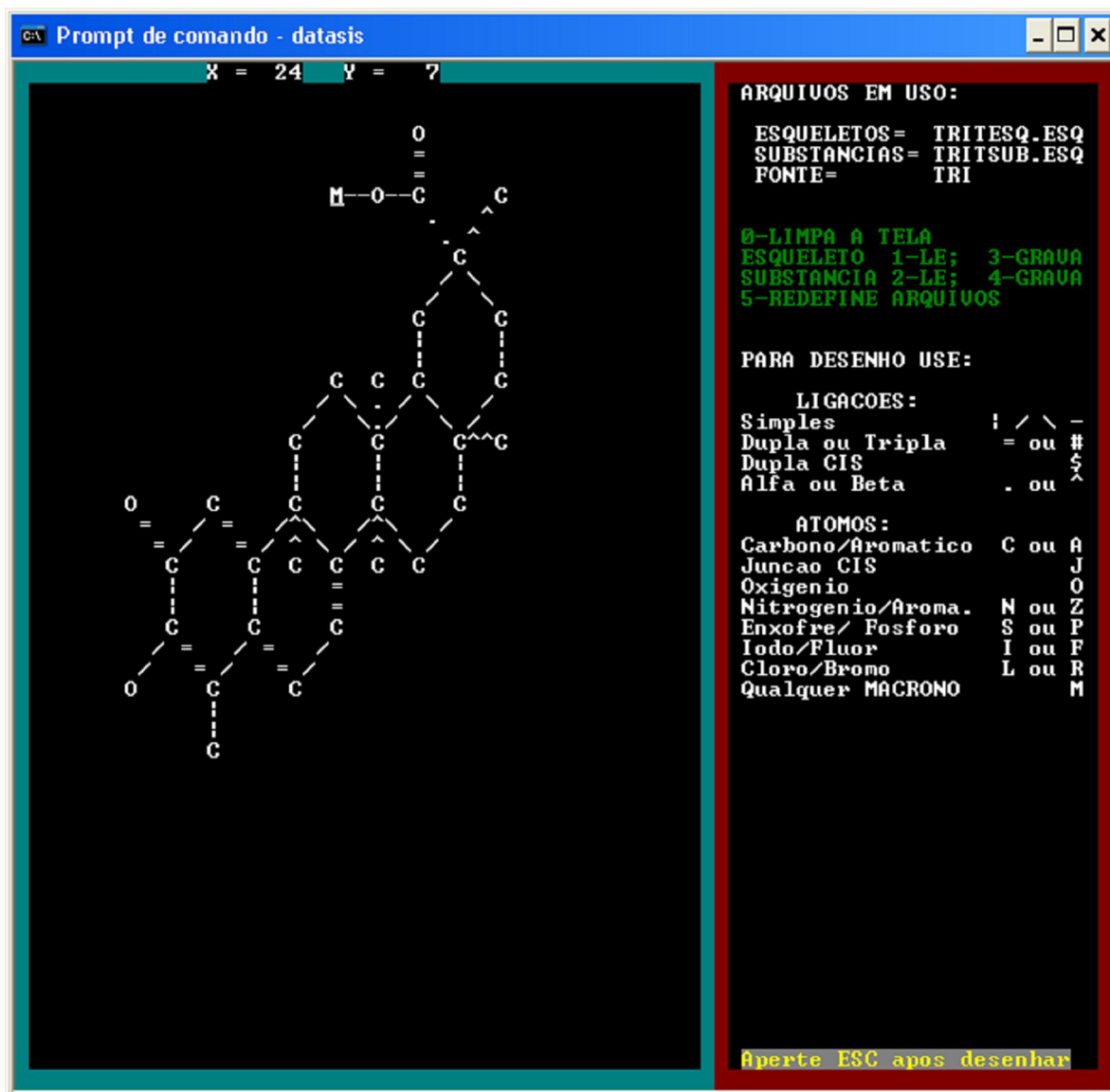


Figura 5. Aparato de desenho do programa DATASIS.

A codificação da substância no SISTEMAT é elaborada através da técnica do vetor reduzido. Esta técnica consiste na criação de um vetor, o vetor nó, que define a seqüência de valores e as posições dos elementos. Um método de codificação arbitrário, através do qual a substância é numerada, foi criado para a construção do vetor nó.

Regras para a obtenção do vetor nó, *sensu* FERREIRA, 2003:

A - São numerados os nós monoatômicos, que são átomos ligados por uma única ligação a um único átomo de uma cadeia carbônica (Figura 6, átomos 01, 02, 03, 04, 05 e 06).

B - A numeração deve ser adequada para que o programa possa evidenciar a estereoquímica nos centros quirais. Assim, foi estabelecido que, se um átomo estiver em posição alfa, o programa irá considerar que todas as suas ligações com átomos de maior numeração serão alfa, o mesmo sendo aplicado às ligações beta. A elaboração do vetor nó terá, seqüencialmente, os seguintes dados:

1. Inicialmente serão indicados os números iniciais e finais de cada cadeia (Figura 6, átomos 07 e 28).
2. Precedido por -1 é indicado, em ordem numérica dos nós monoatômicos, o número dos átomos aos quais estes estão ligados (Figura 6, -1110713071720), seguidos dos números dos átomos das ligações extras da cadeia principal, isto é, dos átomos com numeração não sequencial que estão interligados (Figura 6, 1228132616251722).
3. Precedido por -2 são indicados os heteroátomos através de seu número atômico e posições que ocupam (Figura 6, -20806).
4. Precedido por -3 são indicadas as posições dos átomos das ligações duplas (Figura 6, -32223).
5. Precedido por -4, indica-se a posição de um átomo pertencente a cada ciclo aromático, pois o programa é capaz de reconhecer os demais átomos do ciclo.
6. Precedido por -5 são indicadas as posições dos átomos das ligações triplas.
7. Precedidos por -6-1 são indicados os átomos que apresentam estereoquímica beta (Figura 6, -6-103050611), por -6-2 os átomos em alfa (Figura 6, -6-201), por -6-3 os átomos com carga positiva e por -6-4 os átomos com carga negativa.
8. Precedidos por -7, indica-se os átomos da junção *cis* de anéis.
9. Precedidos por -8 são indicados as posições e códigos dos grupos substituintes.
10. Através de -9, o vetor nó é encerrado.

(FERREIRA, 2003, p.22)

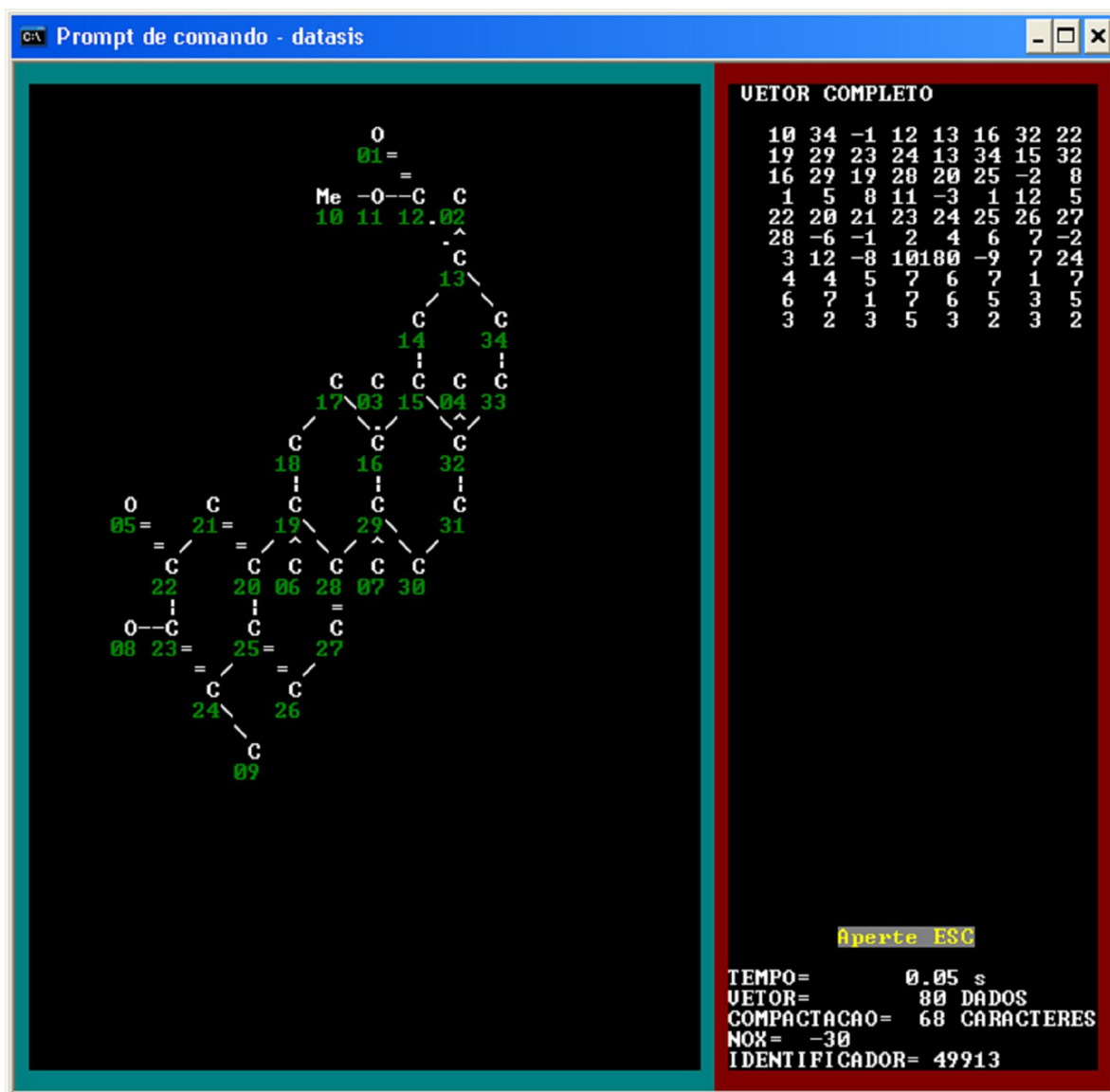


Figura 6. Vetor completo de um triterpeno do tipo quinonametídeo mostrado na tela.

A sequência numérica denominada de vetor nó representa os tipos de ligações, de átomos e o encadeamento dos mesmos que são reconhecidos pelo programa. Entretanto, é necessário que o computador possa reconhecer a estrutura da substância a partir dessa sequência numérica. Sendo assim deve-se indicar a direção dessas ligações. Tal feito é obtido a partir do vetor passos que pode ser encontrado após o vetor nó. O vetor passos consiste primeiramente das “coordenadas do átomo inicial da cadeia, de acordo com a sua posição na tela,

seguida das orientações das ligações que compõem a estrutura” (Figura 7) (FERREIRA, 2003).

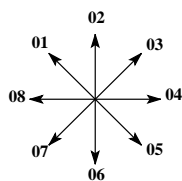


Figura 7. Direção das ligações do vetor passos.

Após a confirmação da estrutura da substância que se segue ao desenho e codificação, é mostrado na tela o vetor completo da substância, o tempo e o número de “bytes” empregados na compactação, o número de oxidação da substância e o identificador matemático.

Posteriormente, informações como a classe química à qual pertence a substância, o tipo de esqueleto, referências e dados botânicos são inseridos em uma única tela (Figura 8). Assim, quando da entrada de uma nova ocorrência para uma substância já existente no SISTEMAT, algumas informações como classe e tipo de esqueleto não precisam ser novamente inseridos.

O item referência abrange os nomes das revistas à qual é dado um código numérico, o ano e a página da publicação, sendo então armazenadas em um banco denominado de BREV. Além disso, pode-se introduzir novas revistas a partir de um programa denominado REVISIS.

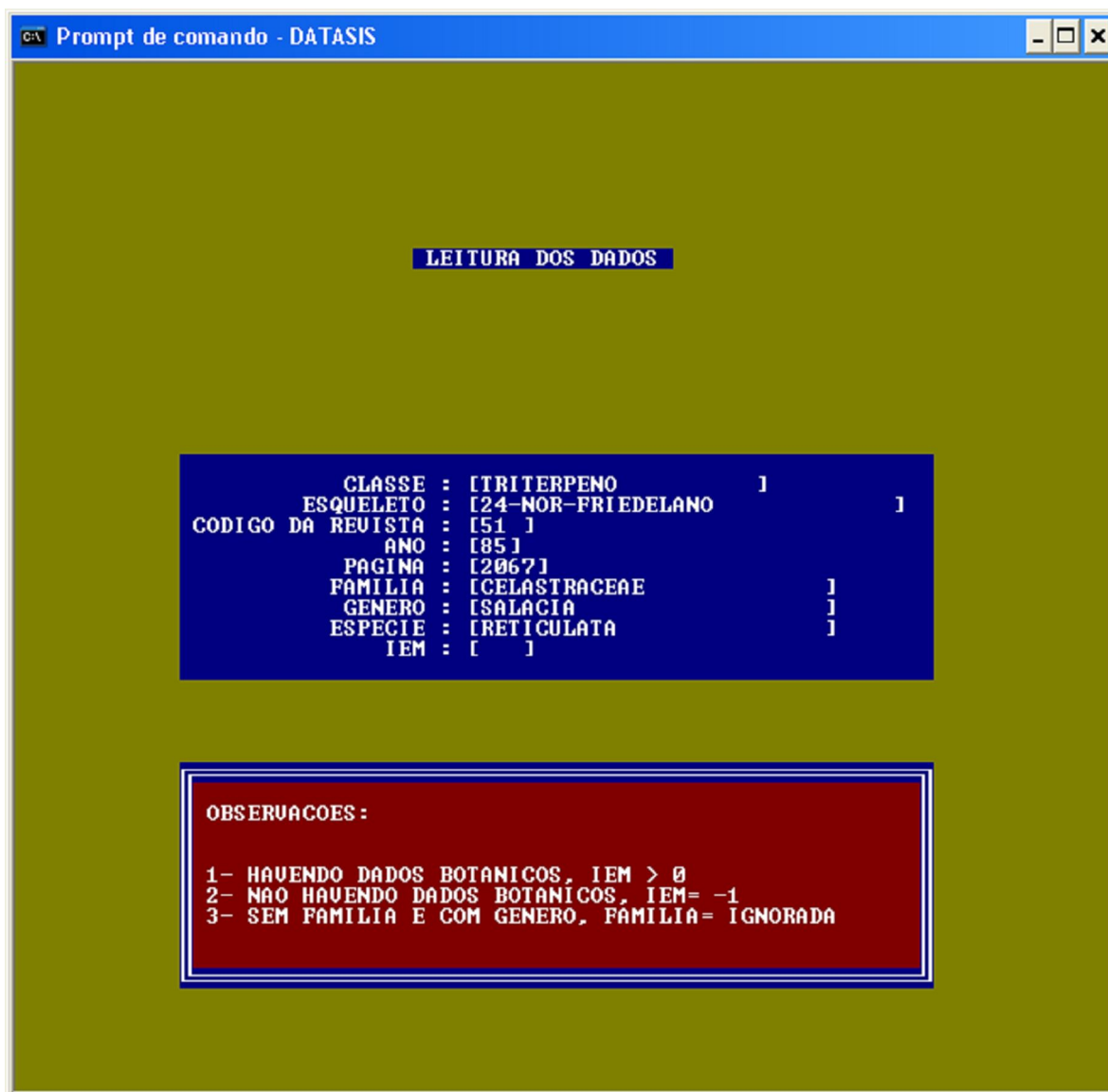


Figura 8. Tela de leitura de dados do DATASIS.

Os dados botânicos que podem ser armazenados são família, gênero e espécie. Não é um item obrigatório, mas para o quimiossistemata, essas informações são de vital importância para inferir relações taxonômicas, rotas biossintéticas e outras.

Outros dados podem ser também armazenados no DATASIS como os dados físico-químicos. Entretanto para a correta inserção desses dados é necessário organizar o sistema tornando-o "executável". Tal tarefa é

desempenhada pelo ARQUISIS que perfaz a distribuição dos dados dos bancos fontes em bancos interligados onde é encontrado apenas um tipo de informação (Tabela 2). Posteriormente podem ser inseridos dados físicos-químicos como espectrometria de massas, infravermelho, ^{13}C RMN, vetor biogenético e outros.

Tabela 2. Bancos de dados distribuídos e interligados do SISTEMAT (FERREIRA, 2003)

Banco de dados	Dados existentes
BNUM	Número matemático criado para cada substância
BTIP	Classe das substâncias e tipos de dados
BESQ	Nome dos esqueletos
BREF	Referências bibliográficas
BREV	Nome das revistas
BESP	Nome das espécies
BGEN	Nome dos gêneros
BFAM	Nome das famílias
BCOMP	Código das substâncias
BDTA	Dados físico-químicos

Um outro programa integrante do SISTEMAT, denominado de SISLIST, lista o número de ocorrências botânicas e de tipos de esqueletos presentes no banco de dados.

PROGRAMA SISTAX

A aplicação do programa SISTAX (ALVARENGA *et al.*, 2003) ao banco de dados do SISTEMAT permite a busca de tipos de esqueletos, classes químicas e grupos funcionais em determinado nível taxonômico (família ou gênero). Esse procedimento, realizado no sistema MS-DOS, pode correlacionar dados botânicos com quaisquer tipos de restrições químicas adotadas sendo muito útil em análises

quimiossistemáticas. O programa consiste em fazer buscas orientadas por certos parâmetros químicos estruturais.

Inicialmente é mostrada uma tela onde se pode inserir informações botânicas e químicas, como o táxon onde se deseja realizar a busca, a classe química e os tipos de esqueleto (Figura 9).

```
Type the database's name to record the results: CEL01
Type the code number where the biosynthetic vetor is stored: 09

Botanical constraints

The search will be made at the level of:
1.Families
2.Genera

Choose:2
Type the family's name: Celastraceae

Structural constraints

1.Chemical classes
2. Skeletal types
3.One specific skeleton
4.Finish

Choose:3
Type of skeleton: Quinonemethide
Are there other constraints, Y / N? N

END
```

Figura 9. Tela do programa SISTAX.

Por essa metodologia, pode-se obter no banco de dados armazenado no SISTEMAT a distribuição das classes químicas no nível hierárquico escolhido, ou para uma classe química específica, os tipos de esqueleto existentes ou um tipo específico de esqueleto.

A busca no banco de dados pode ser refinada a partir do estabelecimento de condições para o aparecimento de determinada subestrutura em um tipo de esqueleto e/ou classe. O resultado é o número de ocorrências das substâncias que apresentam uma característica química em particular no táxon em estudo, por exemplo, grupamentos hidroxilas, ligações duplas conjugadas, anéis aromáticos e outros. Os grupamentos químicos, os tipos de subestrutura e os tipos de ligação são representados na tela do programa SISTAX por um número mostrado nas tabelas (Tabela 3, Tabela 4 e Tabela 5).

Tabela 3. Códigos dos grupamentos químicos utilizados na codificação do SISTAX

Átomos	Código	Átomos	Código	Átomos	Código
-CH ₃	01	=C=	12	-F	23
-CH ₂ -	02	=O	13	-Cl	24
 -CH-	03	-OH	14	-Br	25
 -C- 	04	-O-	15	-I	26
=CH ₂	05	-NH ₂	16	-SH	27
=CH-	06	-NH-	17	-S-	28
 -C=	07	 -N-	18	=S	29
TCH-	08	=NH	19	 -S=	30
TC-	09	=N-	20	 =S=	31
HC*	10	TN	21	P	32
C*	11	N*	22		

T = representação de ligação tripla; // * = representação de carbono aromático

Tabela 4. Código de subestruturas utilizado pelo programa SISTAX

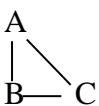
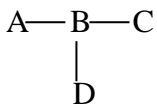
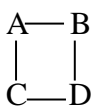
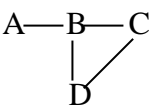
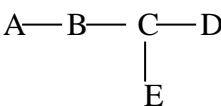
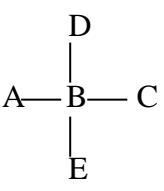
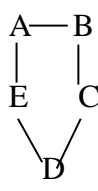
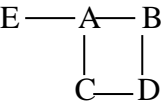
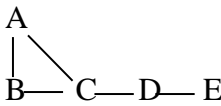
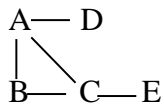
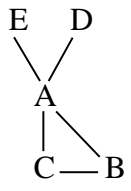

Subestrutura	Código	Subestrutura	Código
A	01	A—B	02
A—B—C	03	A—B—C—D	05
	04		06
	07		08
A—B—C—D—E	09		10
	11		12
	13		14
	15		16
	17		

Tabela 5. Códigos das ligações químicas utilizadas na codificação do SISTAX.

Tipo de ligação	Código
Simples	01
Dupla	02
tripla	03

Para registrar, por exemplo, o número de ocorrências de um esqueleto quinonametídeo com um grupamento carbonila na posição do carbono 21 em um dado táxon escolhe-se os códigos da subestrutura adequada, dos grupamentos químicos envolvidos nessa subestrutura e dos tipos de ligação entre esses átomos (Figura 10) e os insere na tela do programa SISTAX (Figura 11).

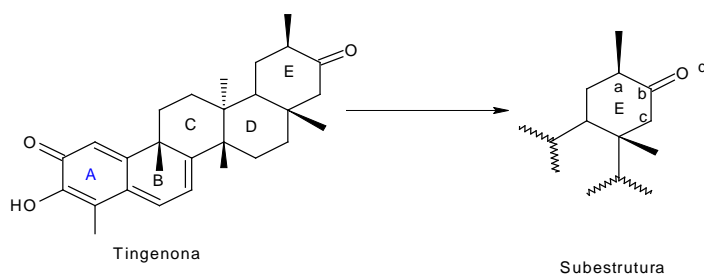


Figura 10. Subestrutura a ser analisada pelo programa SISTAX.

Type the database's name to record the results: **CEL01**
 Type the code number where the biosynthetic vetor is stored: **09**

Botanical constraints

The search will be made at the level of:
 1.Families
 2.Genera

Choose:2
 Type the family's name: **Celastraceae**

Structural constraints

1.Chemical classes
 2. Skeletal types
 3.One specific skeleton
 4.Finish

Choose:3
 Type of skeleton:**Quinonemethide**
 Are other constraints, Y/N? **Y**

First condition about the quinonemethide skeleton:
 Type the substructure: **06**
 Type the atomic group codes: **03070213**
 Type the bond codes:**010102**
 Biosynthetic constraints: the atom X must have the number Y:
Type X and Y in order n12, or <enter> **2107**

Are there other constraints, Y/N? **N**

Imposed constraints: the atom 21 must have the number 07
END

Figura 11. Tela do Programa SISTAX

RESULTADOS & DISCUSSÃO

SUPERORDEM SANTALIFLORAE

ORDEM SANTALES

ASPECTOS BOTÂNICOS

A ordem Santales (*sensu* Dahlgren, 1980) é composta por sete famílias: Olacaceae, Opiliaceae, Loranthaceae, Misodendraceae, Eremolepidaceae, Santalaceae e Viscaceae e abrange 155 gêneros e cerca de 1500 espécies de distribuição pantropical e temperada, cujo hábito vai de arbóreo a herbáceo, com algumas lianas.

A principal característica dessa ordem é o parasitismo de suas espécies. Dentre as Angiospermae, a ordem Santales é a que apresenta o maior número de espécies parasitas (NICKRENT; FRANCHINA, 1990). Há uma notável diversidade dos modos de nutrição no táxon, consistindo em espécimes autotróficos, hemiparasitas aéreos e de raiz. Alguns como o gênero *Arceuthobium* (Viscaceae) é um hemiparasita aéreo que se aproxima do holoparasitismo, ou seja, quando a planta depende totalmente do hospedeiro para a sua nutrição e desenvolvimento. Entretanto, a grande maioria das espécies é hemiparasita aéreo que, na língua inglesa denomina-se “mistletoe”, e no Brasil são chamadas genericamente de “erva-de-passarinho” devido a maneira como ocorre na maioria das vezes, a dispersão das sementes – através dos pássaros (LEAL *et al.*, 2006).

Hemiparasitismo significa que a planta é capaz de fazer fotossíntese, no entanto, necessita de água e sais minerais do hospedeiro. Dispõe para esse intento, de um órgão especializado com aspecto de raiz chamado haustório que penetra na casca até o xilema e serve também como meio de sustentação da

planta (AUKEMA, 2003). Por outro lado, espécies do gênero *Arceuthobium* (Viscaceae) apresentam baixa taxa de fotossíntese, dependendo assim dos açúcares do hospedeiro. Nesse caso, ocorre invasão também do floema da planta hospedeira pelo haustorio.

As famílias Loranthaceae e Viscaceae abrangem cerca de 98% das espécies hemiparasitas aéreas correspondendo aproximadamente a 940 e a 350 espécies, respectivamente (WATSON, 2001).

Espécies dessas famílias parasitam uma série de hospedeiros de diferentes famílias. Como por exemplo, espécies de *Nothofagus*, *Coprosma*, *Pseudopanax* (NORTON; LANGE, 1999), *Casuarina*, *Acacia*, *Croton*, *Pyrus*, *Eucalyptus*, *Melaleuca*, *Grevillea* e outras (DOWNEY, 1998). O número de espécies parasitadas costuma ser grande (Tabela 6) e por isso, essas plantas podem ser encontradas em diversos biomas. Entretanto, a grande diversidade desse grupo de plantas ocorre nas florestas e em áreas arborizadas (WATSON, 2001).

Tabela 6. Número de espécies hospedeiras parasitadas por algumas espécies da família Loranthaceae e Viscaceae. (adaptada de DEVKOTA, 2005).

Espécies	Família	Número de espécies hospedeiras
<i>Dendrophthoe falcata</i>	Loranthaceae	401 (227 gêneros e 77 famílias)
<i>Macrosolen cochichinensis</i>	Loranthaceae	27 (23 gêneros)
<i>Scurrula spp.</i>	Loranthaceae	167 (128 gêneros e 82 famílias)
<i>Viscum album L.</i>	Viscaceae	452 (96 gêneros e 44 famílias)

As conseqüências do parasitismo para as plantas hospedeiras são diversas como a redução do crescimento, a diminuição da quantidade e da qualidade do lenho, a redução do tamanho e da quantidade de frutos, uma susceptibilidade aumentada ao ataque de insetos e fungos e mortalidade prematura (DEVKOTA, 2005). Espécies do gênero *Arceuthobium* são hemiparasitas específicos por parasitarem unicamente espécies de Pinaceae e Cupressaceae. Assim, esse gênero tem um impacto significativo na economia das regiões madeiras nas florestas de coníferas do Noroeste dos Estados Unidos e do Canadá, principalmente na Columbia Britânica e Alberta. Espécies de *Arceuthobium* são um dos mais importantes agentes envolvidos na taxa de mortalidade de florestas naturais de coníferas. A infecção afeta o tempo de vida da planta, o crescimento, a reprodução e, caracteristicamente, o hospedeiro se defende pela emissão de galhas, de modo desordenado formando estruturas compactas nos galhos sendo denominadas de “vassoura de bruxa” (ROSS, 2006).

As espécies hemiparasitas de raiz são encontradas principalmente em Santalaceae, em Opiliaceae e minoritariamente em Olacaceae.

As espécies de Santalaceae são em sua grande maioria hemiparasitas de raiz e ao contrário de outros parasitas, espécies como *Santalum album* L. são apreciadas devido ao alto valor comercial de sua madeira. O gênero *Osyris* parasita principalmente *Amygdalus communis* L., *Olea europaea* L., *Vitis vinifera* L., *Cupressus sempervirens* L., *Acacia cyanophylla* Lindl. e *Rhamnus palaestina* Boiss (QASEM, 2006). A espécie *Santalum album* L. parasita cerca de 300 espécies de plantas, inclusive ela mesma. Em plantações comerciais as espécies hospedeiras preferidas são *Casuarina equisetifolia* L., *Terminalia catappa* L.,

Acacia spp. e outras. (TAIDE *et al.*, 1994). Olacaceae abrange tanto espécies autotróficas quanto espécies hemiparasitas de raiz. Espécies do gênero *Portucala* e *Amaranthus*, além de *Acacia* são algumas das plantas hospedeiras.

Sob o ponto de vista filogenético, Olacaceae é considerada o grupo base do qual se originaram todas as outras famílias de Santalales. Por sua vez, Viscaceae é a família mais evoluída dentro da ordem devido às características morfológicas e funcionais como, por exemplo, a diminuição da quantidade de clorofila no gênero *Arceuthobium* (NICKRENT & FRANCHINA, 1990).

PERFIL QUÍMICO

As substâncias majoritárias encontradas na ordem são os sesqui- e monoterpenos do óleo essencial, os ácidos graxos e os flavonóides. A produção de mono- e sesquiterpenos foi registrada nas famílias Olacaceae e principalmente em Santalaceae. A família Olacaceae caracteriza-se pela presença em maior quantidade dos monoterpenos no óleo essencial, principalmente α -pineno. No gênero *Ximenia americana* L. a concentração do aldeído aromático, benzaldeído, corresponde a 63,5% do óleo essencial. Os ácidos graxos não-saturados de cadeia longa, principalmente os derivados poliacetilênicos, são característicos de Olacaceae, sendo encontrados também em Loranthaceae. Os flavonóides foram encontrados, até o momento, principalmente em Santalaceae, Loranthaceae e Viscaceae. Em Loranthaceae predominam os flavonóis com raras flavonas, Viscaceae apresenta principalmente flavonóis, além de algumas flavonas e flavanonas e em Santalaceae são encontrados flavonóis, flavonas, flavanonas, flavans e catequinas.

Ocorrem ainda, triterpenóides, alcalóides, substâncias sulfatadas, lactonas sesquiterpênicas e norditerpênicas, lignanas, arilpropanóides, diarileptanóides, xantona, heptitol e tioninas.

Foram encontradas 768 ocorrências de metabólitos especiais para o táxon e foi calculada a percentagem do número de ocorrências para as classes de substâncias majoritárias (Figura 12).

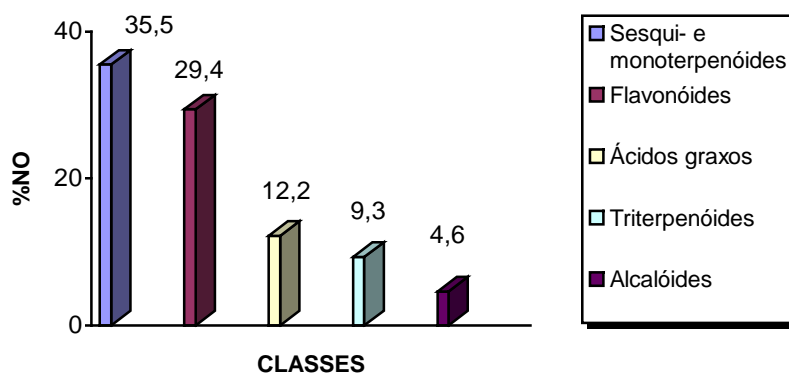


Figura 12. Percentagem do número de ocorrências (%NO) de metabólitos especiais majoritários para a ordem Santalales.

CONSIDERAÇÕES SOBRE A QUIMIOSSISTEMÁTICA DA ORDEM SANTALALES.

De acordo com estudos filogenéticos para a ordem, o parasitismo inerente ao grupo evoluiu de maneiras diversas dentro do grupo. Assim, a família Olacaceae, que apresenta um posicionamento basal na ordem, abriga espécies hemiparasitas de raiz, mas não aéreas. Por outro lado, Viscaceae, considerada a mais evoluída na ordem, congrega somente hemiparasitas aéreas. Loranthaceae e Santalaceae abrangem tanto hemiparasitas aéreas quanto hemiparasitas de raiz, esses últimos em maior número em Santalaceae.

Do ponto de vista químico, o estudo do perfil flavonoídico bem como dos parâmetros químicos de avanço evolutivo para as famílias acima (Figura 13 e Figura 14) concorda com os achados filogenéticos para a ordem.

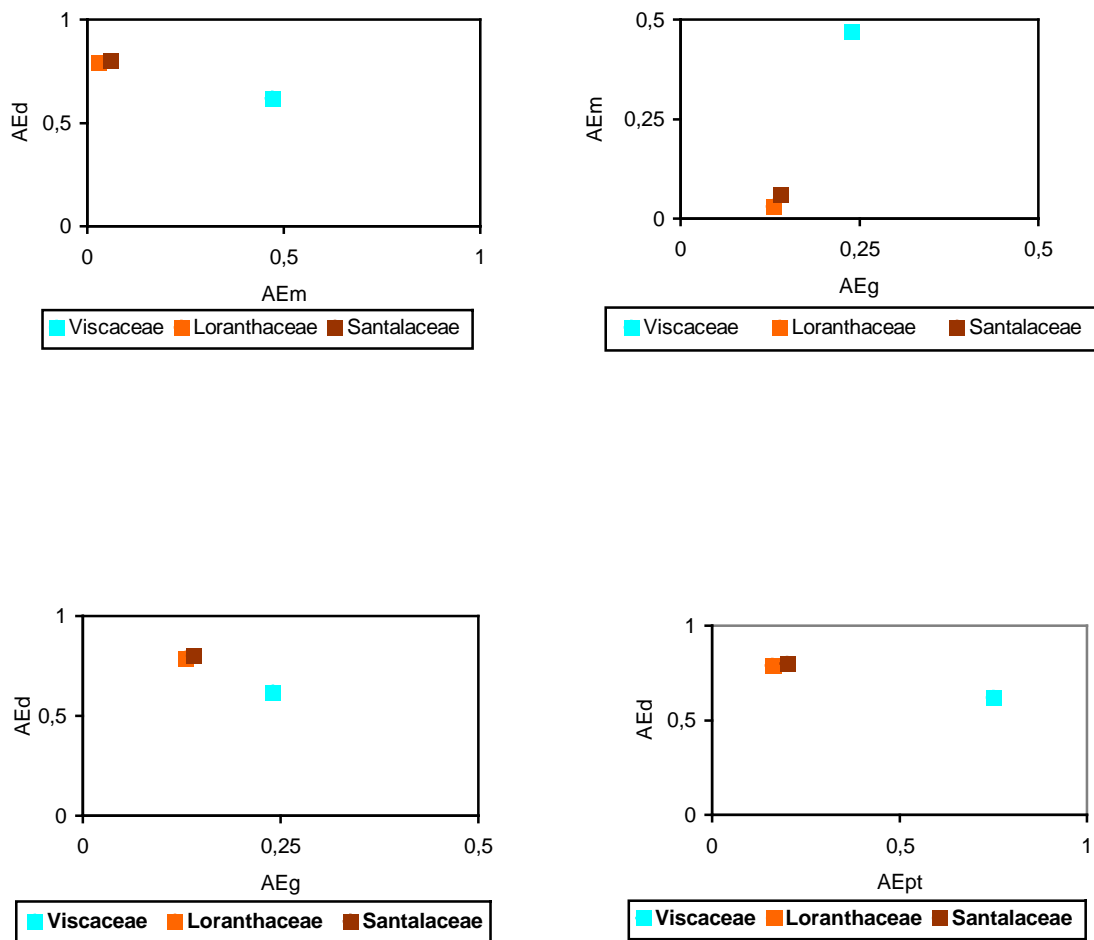


Figura 13. Correlação dos parâmetros químicos de avanço evolutivo (AEg, AEm, AEd e AEpt) entre si, para algumas famílias de Santalales.

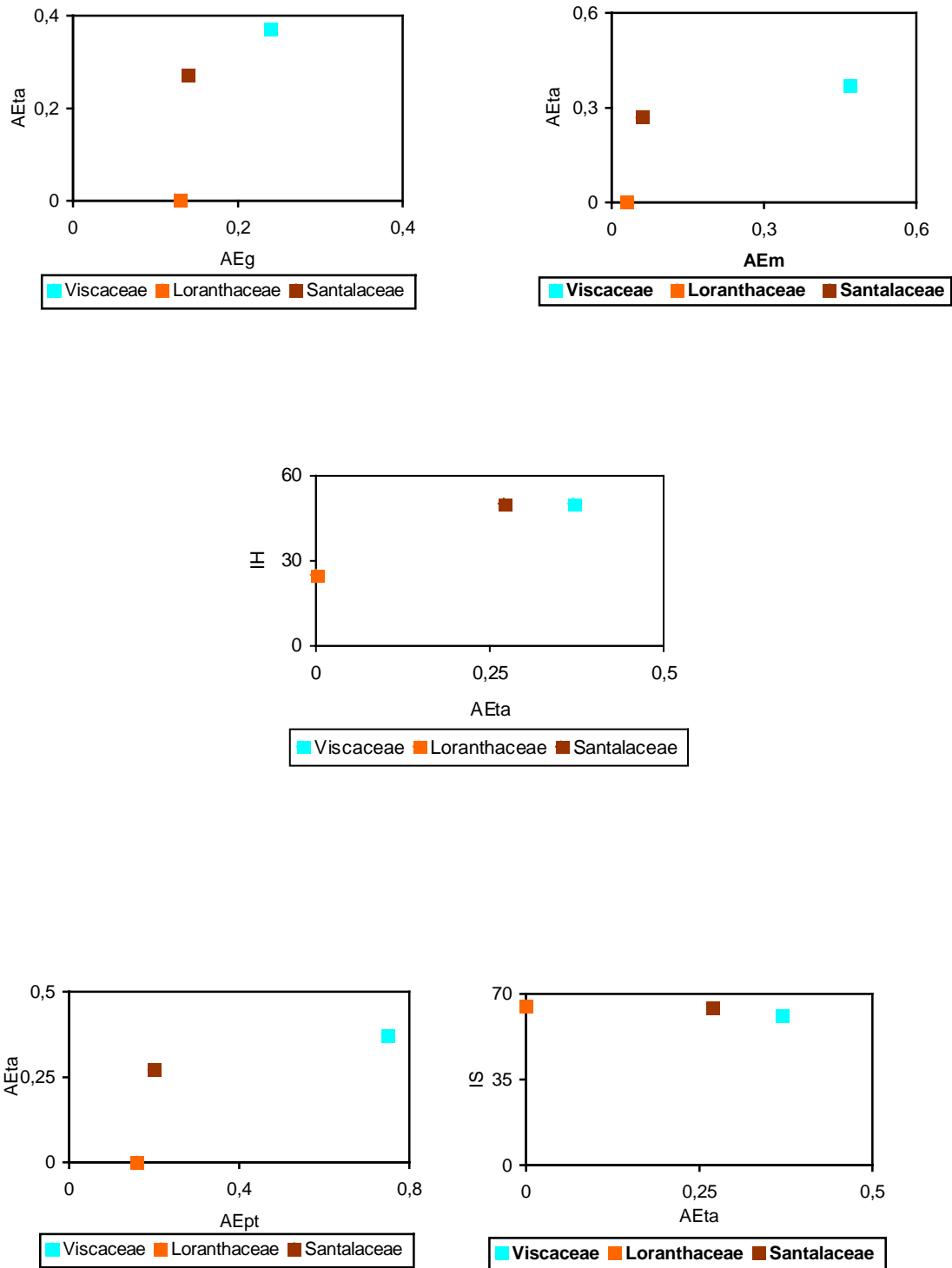


Figura 14. Correlação dos parâmetros químicos de avanço evolutivo (AEG, AEm, AEt e AEpt) entre si, além da correlação do AEt com os índices de Sporne (IS) e Herbacidade (IH) para algumas famílias de Santalales.

Os gráficos acima demonstram que as hidroxilas flavonoídicas encontram-se bastante desprotegidas, principalmente em Loranthaceae e Santalaceae. Nesses táxons, quando protegidas o fazem por glicosilação. Por sua vez, em Viscaceae a metilação é o principal mecanismo de proteção desses grupos químicos, onde há também um menor grau de desproteção dos mesmos.

Nota-se ainda, que Viscaceae apresenta os maiores valores para o avanço evolutivo com relação à transformação do anel (AETa), além de proteger consideravelmente as hidroxilas flavonoídicas. Além disso, a família caracteriza-se pela ocorrência de espécies arbustivas. Sob o ponto de vista evolutivo, essas características químicas mostram tendências mais evoluídas no táxon quando comparadas com as das outras famílias estudadas.

Um outro aspecto importante é que a análise química reforça a idéia de separação das famílias Viscaceae e Loranthaceae (NICKRENT *et al.*, 2002b) como grupos independentes e não como subfamílias de Loranthaceae.

A análise da química flavonoídica de Santalaceae e Loranthaceae mostra que essas famílias são bem próximas e apresentam características menos evoluídas na ordem.

OLACACEAE

ASPECTOS BOTÂNICOS

A família Olacaceae (*sensu* DAHLGREN, 1980) compreende 250 espécies distribuídas por cerca de 28 gêneros. São espécimes de hábito arbóreo, autotróficos ou hemiparasitas de raiz, com distribuição pantropical (MALÉCOT *et al.*, 2004) (Figura 15).

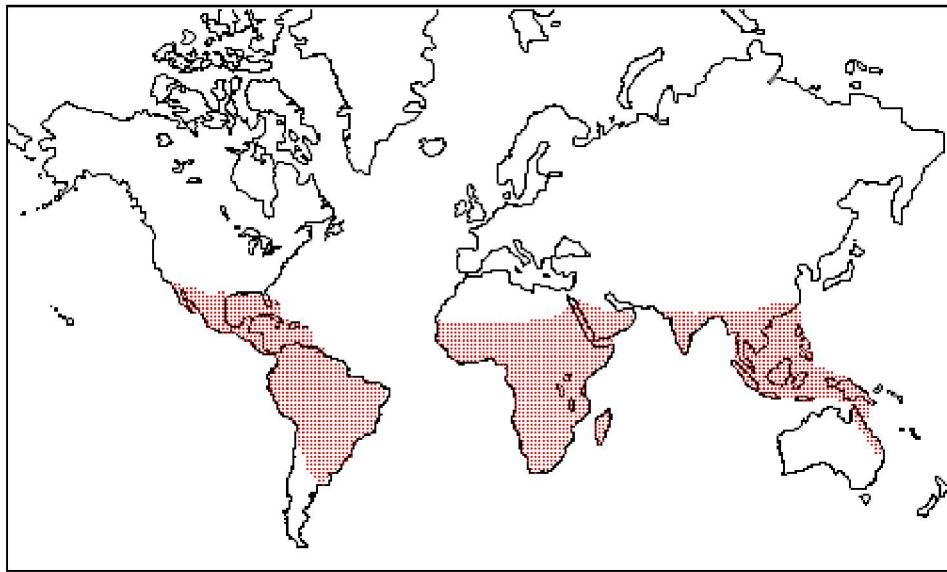


Figura 15. Distribuição de espécies da família Olacaceae.

No Brasil, ocorrem 10 gêneros com aproximadamente 54 espécies, sendo que três desses gêneros - *Douradoa*, *Curupira* e *Ptychopetalum* - são considerados endêmicos (GIULIETTI *et al.*, 2005). (Figura 16).

Entre esses, encontra-se o gênero *Ptychopetalum* originário da região norte do Brasil, cuja espécie *Ptychopetalum olacoides* Benth. conhecida popularmente como Marapuama ou Muirapuama, é tradicionalmente utilizada como “tônico para

os nervos” e afrodisíaco. Estudos farmacológicos com essa planta constataram um efeito positivo do extrato etanólico sobre os processos da memória em cobaias (SILVA *et al.*, 2007). Por essa razão, essa espécie é considerada promissora em investigações acerca do mal de Alzheimer e de outras doenças degenerativas do cérebro.



Figura 16. Detalhe do ramo de *Ximenia americana* L.

Do ponto de vista taxonômico, ENGLER (1987) considerou a família formada por três subfamílias e seis tribos. Posteriormente, SLEUMER (1984b) e BRETELER *et al.* (1996) adicionaram novos gêneros, perfazendo as únicas mudanças na classificação infrafamiliar de Engler (Tabela 7).

Os gêneros *Erythralum* e *Octoknema* apresentam um posicionamento incerto, ora se comportando como gêneros, ora representando as famílias monogenéricas Erythralaceae e Octoknemaceae.

Tabela 7. Classificação infrafamiliar de Olacaceae segundo ENGLER (1897) com modificações e adições de SLEUMER (1984b) e BRETELER (1996).

Família	Subfamílias	Tribos	Gêneros
Olacaceae	Anacoloideae Airy- Shaw	Couleae Engl.	<i>Coula</i> Baill.
			<i>Maburea</i> Maas.
			<i>Minquartia</i> Aubl.
		<i>Ochanostachys</i> Mast.	
		Heisterieae Dumort	<i>Chaunochiton</i> Benth
			<i>Heisteria</i> Jacq.
		Anacoloseae Engl.	<i>Anacolosa</i> Blume
			<i>Brachynema</i> Benth.
			<i>Cathedra</i> Miers
			<i>Diogoa</i> Exell & Mendonça
			<i>Engomegona</i> Breteler
			<i>Phanerodiscus</i> Cavaco
			<i>Scorodocarpus</i> Becc.
	<i>Strombosia</i> Blume		
	<i>Strombosiopsis</i> Engl.		
	<i>Tetrastylidium</i> Engl.		
	Olacoideae Sond.	Ximenieae Engl.	<i>Ximenia</i> L.
			Olaceae Horan
		<i>Douradoa</i> Sleumer	
		<i>Dulacia</i> Vell.	
		<i>Malaria</i> Chun & S.K. Lee	
		<i>Olax</i> L.	
		<i>Ptychopetalum</i> Benth.	
Aptandreae Engl.		<i>Aptandra</i> Miers	
		<i>Harmandia</i> Pierre ex Baill	
		<i>Ongokea</i> Pierre	
Schoepfoideae Engl.	Schoepfieae Miers	<i>Schoepfia</i> Schreb.	

PERFIL QUÍMICO

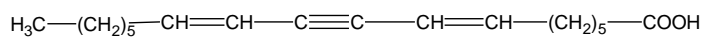
A família caracteriza-se, notadamente, pela ocorrência de ácidos graxos não-saturados de cadeia longa, destacando-se os derivados poliacetilênicos com dezoito átomos carbonos (Tabela 8, Figura 17). Ocorrem no óleo das sementes e chegam a perfazer quase 50% em peso. Muitas dessas substâncias apresentam eventualmente uma ou duas ligações olefínicas. Além disso, a presença de grupos hidroxílicos, cetônicos e epoxílicos em seus esqueletos torna essas substâncias pouco comuns.

Digno de nota é a presença do ácido anacárdico e derivados, um derivado resorcinólico, no gênero *Schoepfia*. Não há registros dessas substâncias em outros gêneros de Olacaceae até o momento. Essas substâncias são encontradas em grandes quantidades na família Anacardiaceae e também em Ginkgoaceae e Gramineae (KOZUBEK; TYMAN, 1999).

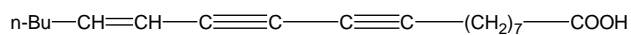
Considerando que o gênero *Schoepfia* é um hemiparasita de raiz não específico e que dentre os gêneros parasitados encontra-se o gênero *Rhus* da família Anacardiaceae (WERTH *et al.* 1979), é provável que a ocorrência de ácido anacárdico no gênero seja proveniente do metabolismo do hospedeiro.

Substâncias sulfuradas presentes em *Scorodocarpus* são características do gênero. Além disso, alcalóides do tipo triptamínico, ciclopeptídico e aminotropânico podem ser encontrados nos gêneros *Heisteria*, *Scorodocarpus* e *Dulacia*, respectivamente (Figura 18, Figura 21).

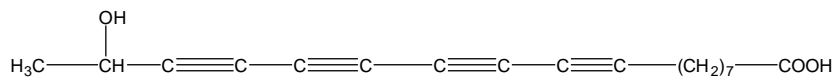
Ocorrem ainda triterpenos e saponinas triterpenoídicas, mormente em *Olax* e *Heisteria* (Figura 22). Os triterpenos encontrados em *Heisteria* são do tipo quinonametídeos, amplamente distribuídos em Celastrales.



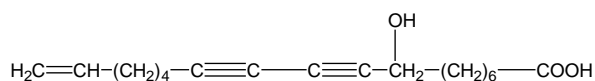
Ácido 7,11-Octadien-9-inoico



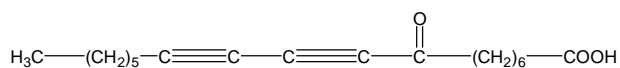
Ácido 13-octadecene-9,11-diinoico



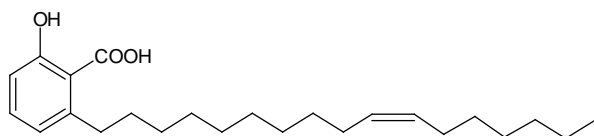
Ácido Minquartinóico



Ácido 8-hidroxi-17-octadecene-9,11-diinoico

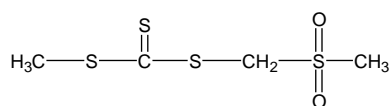


Ácido 8-oxo-9,11-Octadecadiinoico

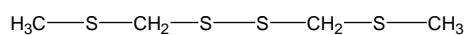


Ácido anacárdico

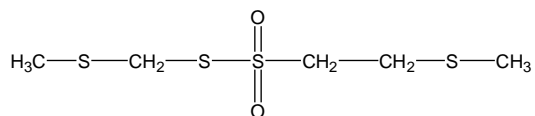
Figura 17. Exemplos de ácidos graxos não saturados de cadeia longa da família Olacaceae



5-tioxo-2,4,6-tritioheptano-2,2-dióxido

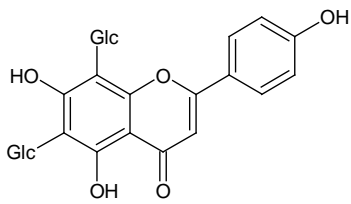


bis(metilmetil)disulfeto

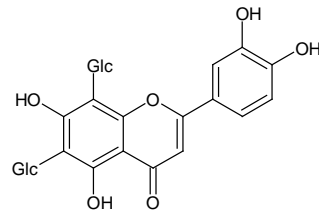


2,4,5,7-tetratiooctano-4,4-dióxido

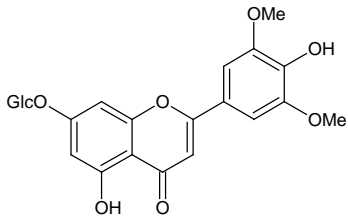
Figura 18. Exemplos de substâncias sulfuradas no gênero *Scorodocarpus* (Olacaceae)



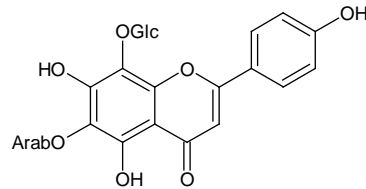
Vicenina 2



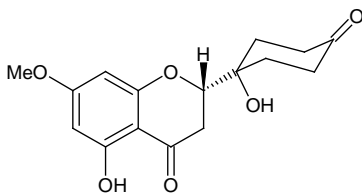
Lucenina



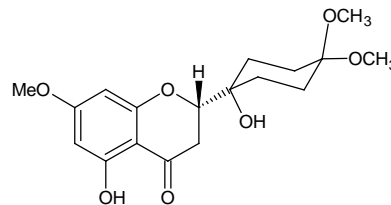
Tricin-7-C-glicosil



6-C-arabinosil-8-C-glicosil-apigenina

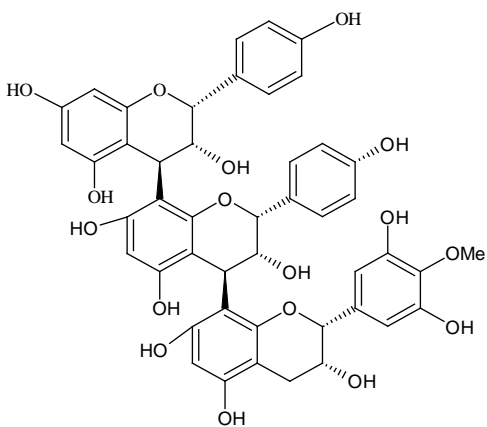


(2S)-ongokeína-4'-one



(2S)- 4,4'-dimetoxi-ongokeína

Figura 19. Exemplos de flavonóides de Olacaceae



(-)-epigallocatequina

Figura 20. Exemplo de tanino condensado em Olacaceae

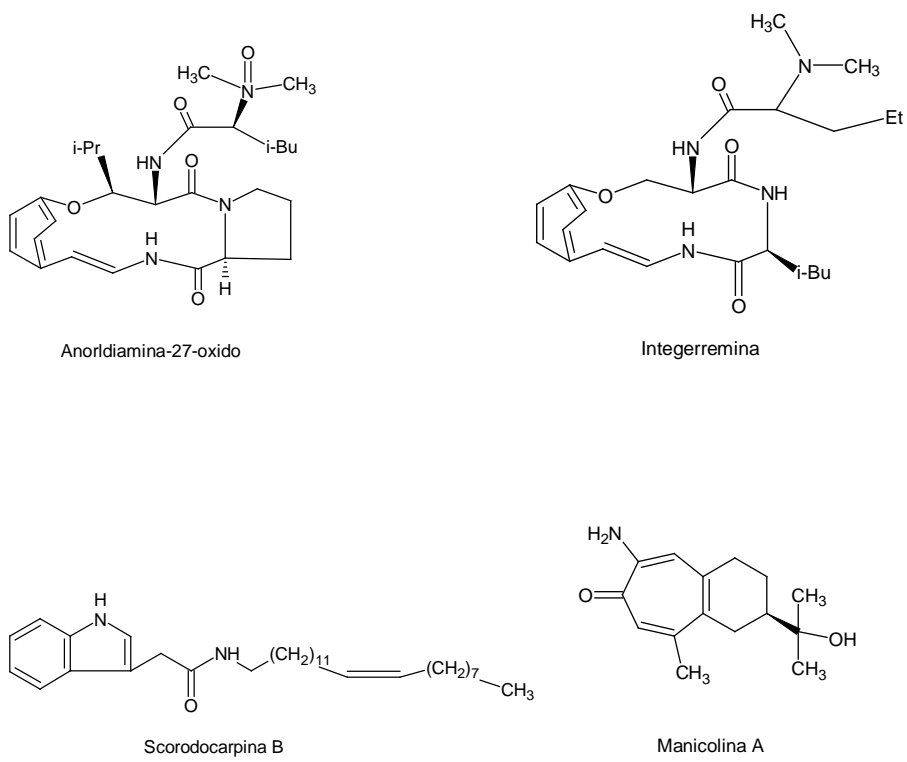


Figura 21. Exemplos de alcalóides em Olacaceae

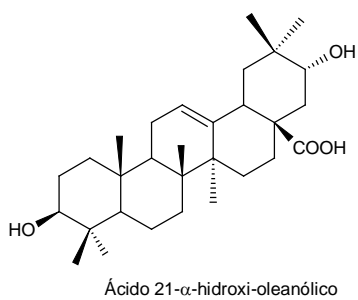


Figura 22. Exemplo de triterpeno de Olacaceae

O perfil flavonoídico consiste principalmente na presença de quercetina e seus derivados, sendo que a ocorrência de miricetina e kaempferol é um evento raro. No entanto, flavonas foram encontradas em maior número, como por exemplo, os derivados C-glicosilados de *Scorodocarpus* e os protoflavonóides no gênero *Ongokea*, um tipo de flavonóide pouco comum onde o anel B é substituído por um grupo cicloexila (Figura 19).

Foram contabilizadas 133 ocorrências de metabólitos especiais em Olacaceae principalmente ácidos graxos de cadeia longa (AGCL) (Figura 23). Os terpenóides são representados pelos mono - e sesquiterpenos do óleo essencial.

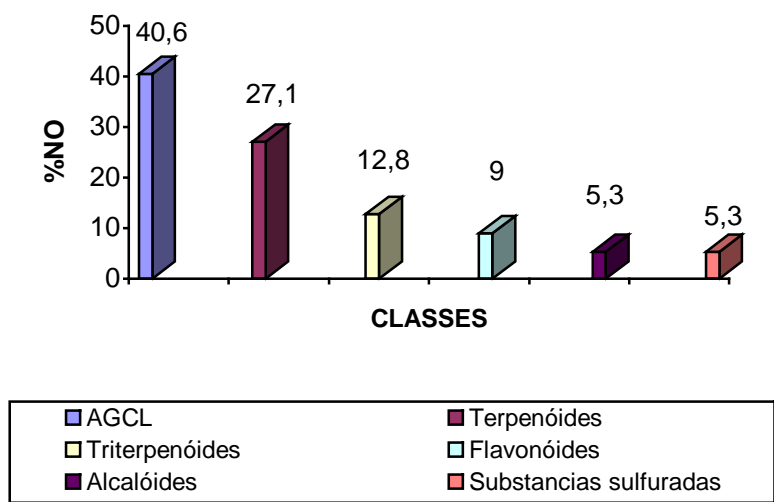


Figura 23. Percentagem do número de ocorrências (%NO) de metabólitos especiais em Olacaceae

Tabela 8. Ácidos graxos não saturados de cadeia longa presentes na família Olacaceae

Gênero	Espécie	Ácido	Referência
Ongokea Pierre	<i>Ongokea gore</i>	8-Oxo-9,11-octadecadiinóico	Miller et al., 1977
		8-Hidroxi-10,12-octadecadiinóico	Miller et al, 1977
		8-Oxo-17-octadecene-9,11diinóico	Miller et al, 1977
		8-Hidroxi-17-octadecene-10,12-diinóico	Miller et al., 1977
		9-Hidroxi-octadecanóico	Miller et al., 1977
		8-Hidroxi-9,11octadecadiinóico	Miller et al., 1977
		8-Hidroxi-17octadecene-9,11diinóico	Miller et al., 1977
		17-Octadecene-9,11-diinóico	Morris, 1963
		9,12-Octadecadiinóico	Morris, 1963
		11-Octadecen-9-inóico	Morris, 1963
		13,17-Octadecadiene-9,11-diinóico	Morris, 1963
		13-Octadecen-9,11-diinóico	Morris, 1963
		Heisteria Jacq.	<i>Heisteria acuminata</i>
8,10,12-Octadecatriinóico	Dunstan et al., 1998		
Trans-pentadec-10-en-6,8-diinóico	Dunstan et al., 1998		
11-Hexadecene-8,10-diinóico	Dunstan et al., 1998		
12-Octadecene-8,10-diinóico	Dunstan et al., 1998		
<i>Heisteria silvanii</i>	7,11-Octadeien-9-inóico		Spitzer et al, 1997
	11-Octadecen-9-inóico		Spitzer et al.,1997
	9,10-Epoxiesteárico		Spitzer et al., 1997
	9,11-Octadecadiinóico		Spitzer et al., 1997
	13-Octadecene-9,11-diinóico		Spitzer et al., 1997
Ximena L.	<i>Ximena caffra</i>	8-Hidroxi-octadecen-9-inóico	Lightelm, 1954
		8-Hidroxi-octadecanóico	Lightelm, 1954
		11-Octadecen-9-inóico	Lightelm, 1954
	<i>Ximena sp.</i>	7-Tetratriacontenóico	Řezanka & Sigler, 2007
		9-Tetratriacontenóico	Řezanka & Sigler, 2007

Tabela 8. Continuação

Gênero	Espécie	Ácido	Referência
<i>Ochanostachys</i>	<i>Ochanostachys</i>	(-)-17-Hidroxi-9,11,13,15-octadecatetraínico	Ito et al., 2001
Mast.	<i>amentacea</i>		
		17,18-Diidroxi-9,11,13,15-octadecatetraínico	Ito et al, 2001
		(S)-17-Hidroxi-15-E-octadecen-9,11,13- trinóico	Ito et al., 2001
<i>Malania</i>	<i>Malania oleifera</i>	cis-15-Tetracosenóico	Zhou et al., 2001
Chun & S.K.Lee			
		Hexadecanóico	Zhou et al., 2001
		9-Octadecenóico	Zhou et al., 2001
		Docosenóico	Zhou et al., 2001
		cis-13-Docosenóico	Zhou et al., 2001
		Tetracosenóico	Zhou et al., 2001
		cis-11-Eicosenóico	Zhou et al., 2001
<i>Minquartia</i> Aubl.	<i>Minquartia</i>	(-)-17-Hidroxi-9,11,13,15-octadecatetraínico	El-Seedi et al., 1994
	<i>guianensis</i>		
<i>Coula</i> Baill	<i>Coula edulis</i>	(-)-17-Hidroxi-9,11,13,15-octadecatetraínico	Fort et al., 2000
<i>Curupira</i> Black	<i>Curupira tefeensis</i>	(E)- 11-Octadecen-9-inóico	Spitzer et al, 1991
		(Z)-11-Octadecen-9-inóico	Spitzer et al., 1991
		9,11-Octadecadiinóico	Spitzer et al., 1991
		13-Octadecen-9,11-diinóico	Spitzer et al., 1991
		Eurúico	Spitzer et al., 1990
		Oléico	Spitzer et al., 1990
		Nervônico	Spitzer et al., 1990
		Cerótico	Spitzer et al., 1990
<i>Schoepfia</i> Schreb.		Oléico	Chen et al., 1998
		Anacárdico	Chen et al., 1998

IMPLICAÇÕES QUIMIOSSISTEMÁTICAS EM OLACACEAE

Os ácidos graxos poliacetilênicos foram encontrados até o momento em quase todas as tribos de Olacaceae, com exceção da tribo Anacoloseae. Em *Ongokea* e *Ximenia* ocorre uma série de derivados 8-hidroxiados que não são encontrados em outros gêneros da família. Nos gêneros *Malania* e *Curupira* a ocorrência significativa de ácidos graxos “comuns” os diferencia de outros gêneros. Sendo assim, a presença dessas substâncias confirma uma afinidade entre os taxons demonstrada por estudos cladísticos apoiados em aspectos morfológicos (MALECÓT *et al.*, 2004) (Figura 24). Além disso, os ácidos graxos podem ser considerados marcadores químicos para a família.

Os gêneros *Coula*, *Ochnostachys* e *Minquartia* pertencentes à tribo *Couleae*, abrangem espécimes autotróficas e caracterizam-se pela ocorrência de derivados poliacetilênicos hidroxiados freqüentemente na posição 17, por exemplo, o ácido minquartinóico, dando suporte à idéia de homogeneidade do táxon do ponto de vista filogenético (Figura 17).

Proantocianidinas foram registradas nos gêneros *Strombosia* e *Scorodocarpus* pertencentes à tribo Anacoloseae Engl. demonstrando uma proximidade entre esses taxons, sugerida tanto por estudos palinológicos quanto por estudos anatômicos (MALECÓT *et al.*, 2004), além disso, ocorrem no gênero *Heisteria* da tribo Heisterieae que apresenta uma certa proximidade de *Strombosia* e *Scorodocarpus* e nos gêneros *Olax* e *Anacolosa*.

Os alcalóides ciclopeptídicos e substâncias sulfuradas produzidas pelo gênero *Scorodocarpus* podem ser considerados marcadores químicos para esse

grupo, pois em nenhum outro gênero da família registrou-se a ocorrência desses metabólitos.

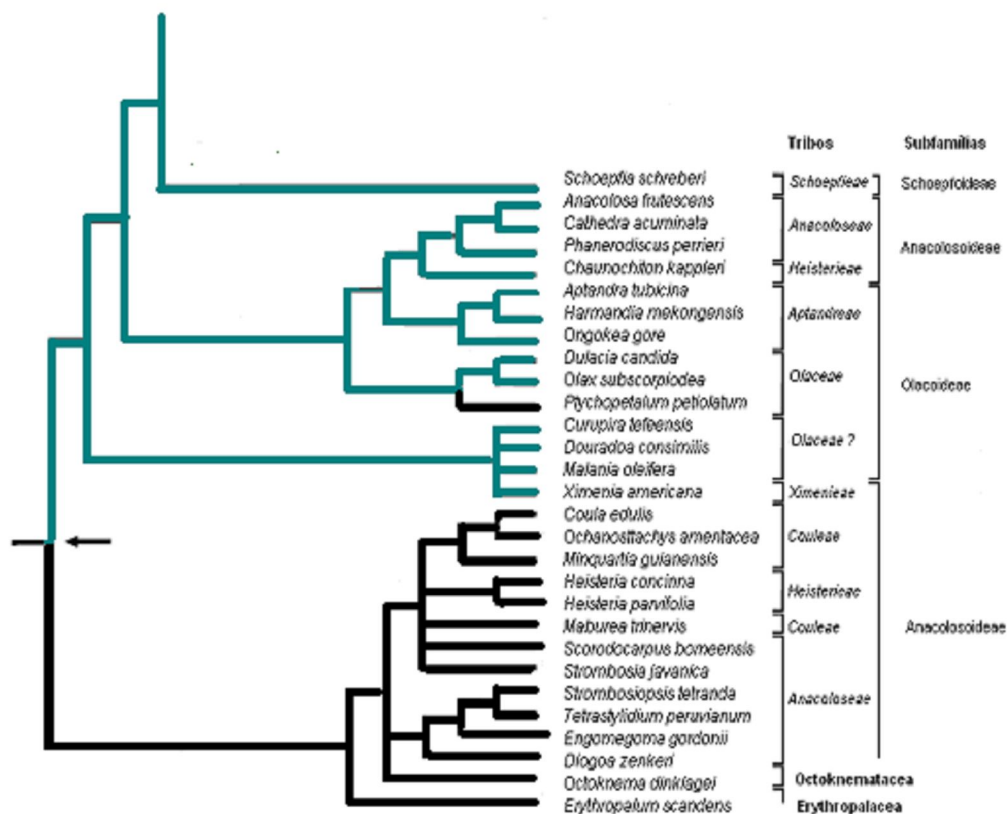


Figura 24. Árvore filogenética baseada em dados morfológicos da família Olacaceae (MALECÓT *et al.*, 2004). As linhas em preto mostram espécies autotróficas ou com modo de nutrição desconhecido, enquanto que as linhas em verde estão relacionadas com espécies hemiparasitas.

Mono - e sesquiterpenos compõem o óleo essencial de *Ximenia* da tribo Ximenieae e *Ptychopetalum* da tribo Olaceae, corroborando uma certa afinidade proposta por estudos filogenéticos (MALECÓT *et al.*, 2004). A substância majoritária do óleo das folhas de *Ximenia americana* L. é o benzaldeído (63,5%), enquanto

que no óleo de *Ptychopetalum olacoides* Bentham, os monoterpenos α - pineno (25,9%), β -pineno (7,8%) e canfeno (6,6%) prevalecem.

Dessa maneira, a química micromolecular confirma a maioria das propostas de afinidade entre os *taxa* da família Olacaceae obtidas a partir de estudos filogenéticos utilizando dados morfológicos. Entretanto, do ponto de vista químico, a espécie *Ximenia americana* L. apresenta, por sua produção de óleo essencial, uma afinidade maior com *Ptychopetalum petiolatum* do que aquela mostrada na árvore filogenética baseada em dados morfológicos (Figura 25). Além disso, a ocorrência significativa de ácidos graxos “comuns” em *Malania oleifera* e *Curupira tefeensis* demonstram uma maior afinidade entre os *taxa*. Sendo assim, o seguinte esquema é sugerido:

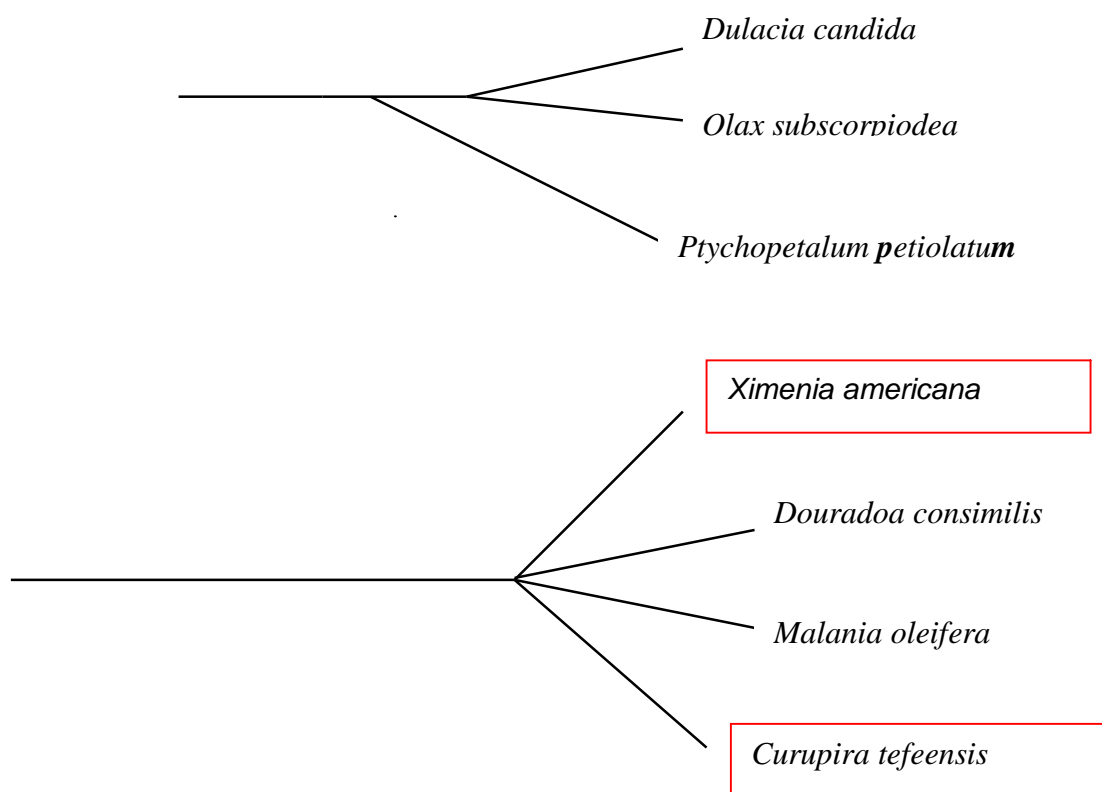


Figura 25. Esquema baseado na árvore filogenética da família Olacaceae (Malecót *et al.*, 2004) mostrando a disposição dos gêneros segundo dados químicos.

LORANTHACEAE

ASPECTOS BOTÂNICOS

A família Loranthaceae (*sensu* DAHLGREN, 1980) é constituída por 75 gêneros e cerca de 1000 espécies de distribuição tropical que se estende por regiões temperadas do hemisfério sul (DEVKOTA, 2005) (Figura 26).

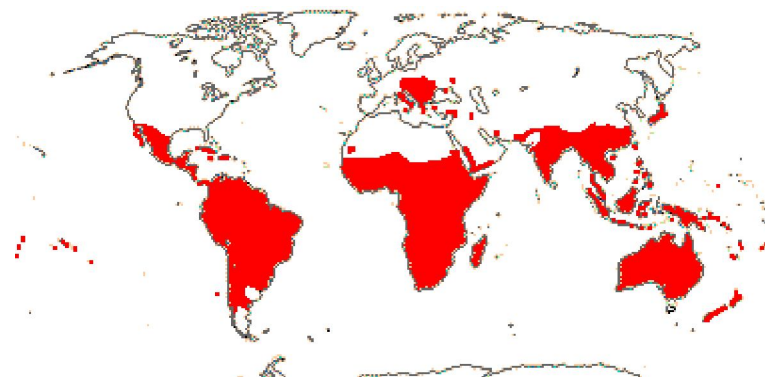


Figura 26. Distribuição das espécies da família Loranthaceae

São plantas de hábito arbustivo, hemiparasitas aéreos, obrigatórios em sua grande maioria. Algumas poucas espécies, restritas a três gêneros (*Atinksonia*, *Gaiadendron* e *Nuytsia*), são parasitas de raízes – um hábito considerado ancestral no táxon (WILSON; CALVIN, 2006).

Danser (1933) reconheceu duas subfamílias em Loranthaceae: Loranthoideae e Viscoideae. Os gêneros da subfamília Loranthoideae foram alocados em quatro tribos - *Elytrantheae*, *Nuytsieae*, *Loranthaeae* e *Psittacanthaeae* (NICKRENT, 2002).

Posteriormente, Barlow (1964) propôs que as subfamílias fossem elevadas às famílias, Loranthaceae e Viscaceae, baseado em dados morfológicos, citológicos e biogeográficos. Com o advento das técnicas de filogenia molecular demonstrou-se que as famílias não eram próximas e que representavam apenas vertentes evolutivas diversas do parasitismo aéreo (NICKRENT, 2002), confirmando a proposta de Barlow.

De acordo com Takhtajan (1997), Loranthaceae é formada por duas tribos: *Lorantheae* e *Elytrantheae*, onde *Lorantheae* abrange somente dois gêneros *Loranthus* e *Psittacanthus* (Figura 27) (Tabela 9).

Tabela 9. Tribos e gêneros da família Loranthaceae *sensu* TAKHTAJAN (1997).

Família	Tribo	Gênero
Loranthaceae	Jussieu	Lorantheae
		<i>Loranthus</i> Jacquin
		<i>Psittacanthus</i> Martius
	Elytrantheae	<i>Gaiadendron</i> G. Don
		<i>Desmaria</i> Van Tieghem
		<i>Notanthera</i> (De Candolle) G. Don
		<i>Atkinsonia</i> Von Mueller
		<i>Nuytsia</i> R. Brown ex G. Don
		<i>Amylotheca</i> Van Tieghem
		<i>Lepeostegeres</i> Blume
		<i>Macrosolen</i> (Blume) Reichenbach
		<i>Elytranthe</i> (Blume) Blume
		<i>Lepidaria</i> Van Tieghem
		<i>Tupeia</i> Chamisso & Schlechtendal



1161. *Loranthus europaeus* Jacquin.

Europäische Kiemenblume.

Figura 27. Aspectos morfológicos de *Loranthus europaeus* Jacq. (THOMÉ, 1885).

PERFIL QUÍMICO

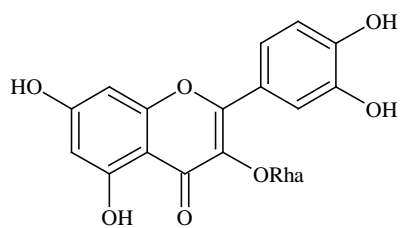
Na família Loranthaceae ocorrem flavonóides, taninos, lactonas sesquiterpênicas, sesquiterpenos, triterpenóides, lactonas diterpênicas, ácidos graxos, xantonas, heptitol, lignana e lecitina.

O perfil flavonoídico consiste majoritariamente de flavonóis com raras flavonas (Figura 28). Além disso, nota-se a expressiva ocorrência de quercetina e seus derivados metoxilados, como ramnetina e isoramnetina, além de derivados glicosilados. A presença de miricetina e kaempferol é bastante rara. Dentre os grupos glicosilas mais encontrados nos derivados flavonoídicos estão as ramnosilas, arabinosilas, xilosilas e glicosilas. Algumas vezes esses glicosídeos encontram-se acetilados como no gênero *Scurrula*, sendo essas substâncias raras em plantas superiores. No gênero *Taxillus* é comum a ocorrência de derivados glicosilados de quercetina esterificados com ácido gálico.

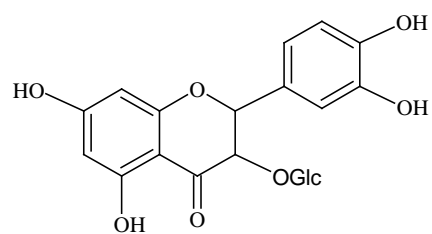
Dentre os flavonóis presentes na família (Tabela 10), quercetrina (3-O- α -L-rhamnosilquercetina) encontra-se amplamente distribuída pelos gêneros *Scurrula*, *Taxillus*, *Helixanthera*, *Dendrophloe* e *Loranthus*. Por sua vez, os derivados O-metilados da quercetina ocorrem principalmente no gênero *Loranthus*. Diidroflavonóis são encontrados no gênero *Scurrula*.

Apesar de raras no táxon, flavonas C-glicosiladas estão presentes no gênero *Macrosolen*. Catequinas e epicatequinas ocorrem em diversos gêneros, sendo poucas proantocianidinas encontradas até agora.

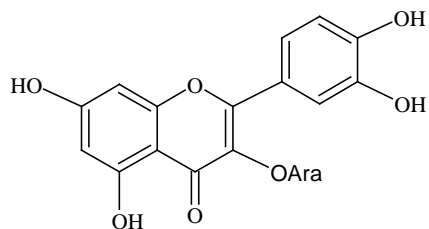
Ácido gálico é comum na família, mas a ocorrência de taninos hidrolizáveis é escassa, sendo encontrados até o momento alguns representantes no gênero *Psittacanthus*.



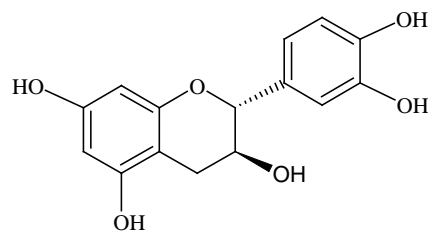
Quercetrina



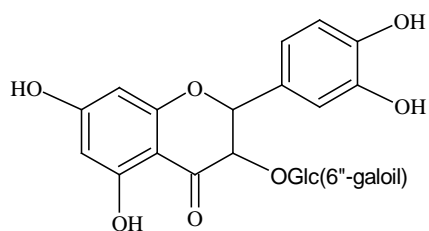
Isoglucodistilina



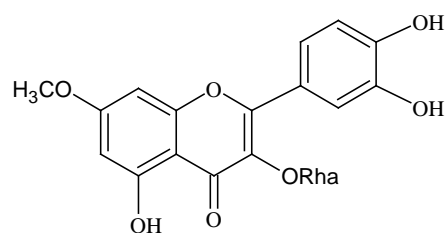
Avicularina



Catequina

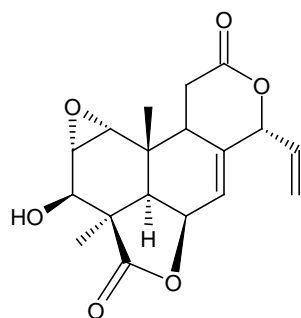


Taxilusina

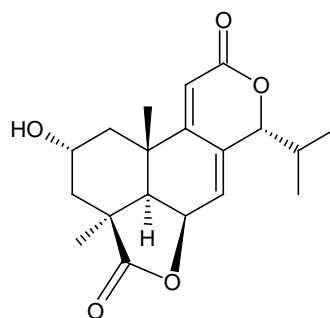


3-O-Rhamnosil-rhamnetina

Figura 28. Exemplos de flavonóides presentes em Loranthaceae.

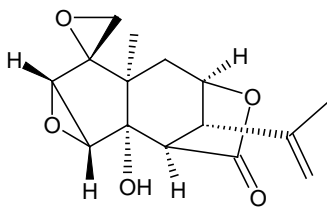


Podolactona A

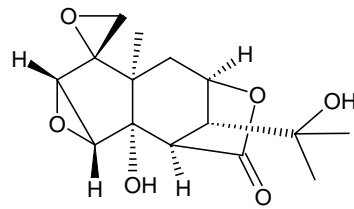


2-Hidroxi-nagilactona F

Figura 29. Exemplos de lactonas norditerpênicas no gênero *Ileostylus* (Loranthaceae).

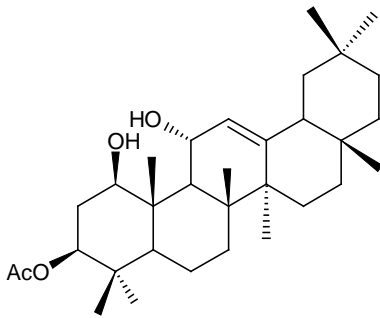


Coriamirtina

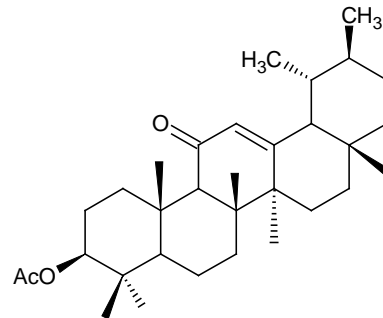


Coriatina

Figura 30. Exemplos de lactonas sesquiterpênicas no gênero *Loranthus* (Loranthaceae).

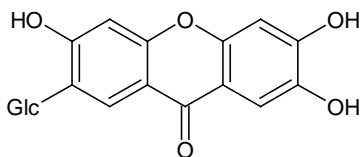


3β-Acetoxy-1β,11α-dihidroxi-oleaneno



3β-Acetoxy-ursen-11-ona

Figura 31. Exemplos de triterpenos de Loranthaceae.



Mangiferina

Figura 32. Exemplo de xantona C-glicosilada no gênero *Dendroptoe*.

Tabela 10. Flavonóides encontrados na família Loranthaceae

Gênero	Espécie	Substância	Referência
<i>Scurrula</i>	<i>S. atropurpurea</i> (Blume) Danser	Quercetina	Ohashi et al., 2003
		Rutina	Ohashi et al., 2003
		Catequina	Ohashi et al., 2003
		Epicatequina	Ohashi et al., 2003
		Epigallocatequina	Ohashi et al., 2003
		3-O-Galoilepigallocatequina	Ohashi et al., 2003
<i>S. ferruginea</i> Danser	<i>S. ferruginea</i> Danser	Quercetina	Lohezic - Le Devehat et al., 2002
		Quercetrina	Lohezic - Le Devehat et al., 2002
		4-O-acetilquercetrina	Lohezic - Le Devehat et al., 2002
<i>S. fusca</i> (Blume) G. Don	<i>S. fusca</i> (Blume) G. Don	Quercetrina	Shibuya et al., 1999
		3-O- β -D-Xilosilquercetina	Shibuya et al., 1999
<i>S. liquidambaricolus</i> (Hayata) Danser	<i>S. liquidambaricolus</i> (Hayata) Danser	Diidroquercetina	Shen et al., 1993
		Diidromiricetina	Shen et al., 1993
		Catequina	Shen et al., 1993
		Epicatequina	Shen et al., 1993
<i>Amyema</i>	<i>A. scandensi</i> Danser	3-O-Glicosilquercetina	Garibaldi et al., 1998
		Quercetrina	Garibaldi et al., 1998
		3-O-Glicosilisorhamnetina	Garibaldi et al., 1998
		Catequina	Garibaldi et al., 1998
		3-O-Galoilepicatequina	Garibaldi et al., 1998

Tabela 10. Continuação

Gênero	Espécie	Substância	Referência
<i>Taxillus</i>	<i>T. bracteatus</i> (Wall.) Tieghem	Quercetina	Seetharaman & Manjula, 1996
		3-O-Neohesperosílquercetina	Seetharaman & Manjula, 1996
		3-O-Glicosílquercetina	Seetharaman & Manjula, 1996
		3-O- α -L-Arabinosilquercetina	Seetharaman & Manjula, 1996
		Miricetina	Seetharaman & Manjula, 1996
	<i>T. levinei</i> (Merril) H.S.Kiu	Isoquercetina	Li et al., 1996
		3-O-(6"-galoil)- β -D-Glicosilquercetina	Li et al., 1996
		3-O- β -D-Glucoronilquercetina	Li et al., 1996
	<i>T. kaempferi</i> (DC.) Danser	Avicularina	Konish et al., 1996
		Hyperina	Konish et al., 1996
		Quercetrina	Konish et al., 1996
		Taxilusina	Sakurai & Okumura, 1978
		Catequina	Konish et al., 1996
Proantocianidina B-1		Konish et al., 1996	
Proantocianidina B-2		Konish et al., 1996	
(+)-Taxifolina		Okoda & Sakurai, 1983	
Isogluco-distilina		Okoda & Sakurai, 1983	
Quercetina	Okoda & Sakurai, 1983		
	3-O- β -D-Glucuronilquercetina	Li et al., 1996	

Tabela 10. Continuação

Gênero	Espécie	Substância	Referência
<i>Taxillus</i>	<i>T. nigrans</i> (Hance) Danser	3-O-(6"-galoil)-β-D-Galactosilquercetina	Li et al., 1995
		3-O-(6"-galoil)-β-D-Glicosilquercetina	Li et al., 1995
		Rutina	Li et al., 1995
		Avicularina	Li et al., 1995
		Isoquercetina	Li et al., 1995
		Catequina	Li et al., 1995
		(+)-7-O-Galoilcatequina	Li et al., 1995
	<i>T. nitichuenensis</i>	Quercetrina	Li et al., 1987
		Quercetina	Li et al., 1987
	<i>T. chinensis</i> (DC.) Danser	Avicularina	Wang et al., 2006
		Quercetrina	Wang et al., 2006
		Isoquercetina	Wang et al., 2006
		Hyperosídeo	Wang et al., 2006
<i>Dendrophthoe</i>	<i>D. falcata</i> (L.F.) Ettingsh	3-O-Rhamnosil-kaempferol	Mallavadhani et al., 2006
		Quercetrina	Mallavadhani et al., 2006
<i>Loranthus</i>	<i>L. tanakae</i> Fr. & Sav.	3-O-α-L-Rhamnosilrhamnetina	Kim et al., 2004
		3-O-α-L-Rhamnosilquercetina	Kim et al., 2004
		3-O-α-L-Rhamnosilrhamnocitrina	Kim et al., 2004
		3-O-α-L-Rhamnosilkaempferol	Kim et al., 2004
	<i>L. longiflorus</i> Ders.	Quercetina	Indrani & Balasubramanian, 1985

Tabela 10. Continuação

Gênero	Espécie	Substância	Referência
	<i>L. europaeus</i> Jacq.	3-O-Rhamnosílrhamnocitrina	Harvala et al., 1984
		3-O-Glucosílrhamnetina	Harvala et al., 1984
		3-O-Rhamnosílrhamnetina	Harvala et al., 1984
	<i>L. pentandrus</i> L.	Quercetrina	Chantarasaboon et al., 1974
	<i>L. globosus</i> Roxb.	Catequina	Sadik et al., 2003
<i>Ligaria</i>	<i>L. cuneifolia</i> (R. & P.) Tiegh	3-O- α -L-Arabinosílquercetina	Fernandez et al., 1998
		Quercetina	Fernandez et al., 1998
		Quercetrina	Fernandez et al., 1998
		3-O-Xilosílquercetina	Fernandez et al., 1998
		2,3-Trans-3,4-cis-leucocianidina	Fernandez et al., 1998
		3-O- β -Arabinosílquercetina	Fernandez et al., 1998
<i>Psittacanttus</i>	<i>P. cuneifolius</i> (Ruiz & Pav.) Blume	Quercetrina	Graziano et al., 1967
		3-O- β -Xilosilquercetina	Graziano et al., 1967
		3-O- β -Arabinosílquercetina	Graziano et al., 1967
		Catequina	Graziano et al., 1967
<i>Macrosolen</i>	<i>M. cochinchinensis</i>	Quercetina	Wang et al., 1996
		Rutina	Wang et al., 1996
		Vicenina	Wang et al., 1996
		Orientina	Wang et al., 1996
<i>Helixanthera</i>	<i>H. parasitica</i> Lour.	Quercetrina	Li et al., 1994

Lactonas sesquiterpênicas estão presentes no gênero *Loranthus*, como coriamirtine, coriatina e corianina (Figura 30). No gênero *Ileostylus* ocorrem lactonas norditerpênicas.

O perfil triterpenoídico da família consiste principalmente de derivados do tipo oleanano, entretanto o número de ocorrências é pequeno. Caracteristicamente no gênero *Scurrula*, os triterpenos apresentam substituições como hidroxilação, metoxilação e etoxilação na posição 11 α (Figura 32). Também ocorrem ácidos graxos poliacetilênicos e olefínicos no táxon. Foi encontrada ainda uma lignana glicosilada denominado de aviculina assim como o terpeno Icariside B.

IMPLICAÇÕES QUIMIOSSISTEMÁTICAS NA FAMÍLIA LORANTHACEAE

Foram registradas 111 ocorrências das principais classes de metabólitos especiais para a família (Figura 33).

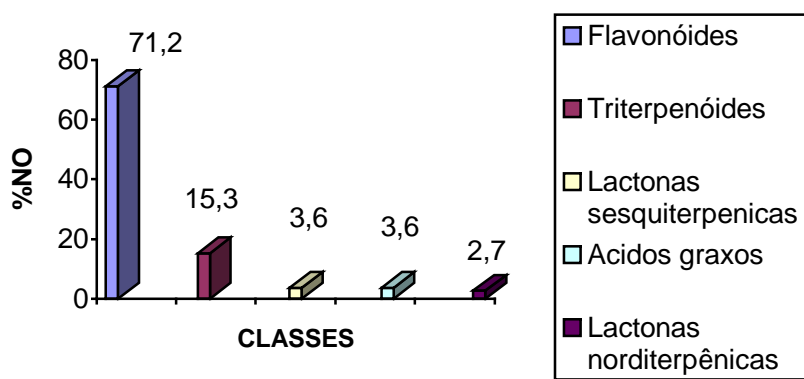


Figura 33. Percentagem do número de ocorrências (%NO) de metabólitos especiais de classes majoritárias em Loranthaceae.

No repertório flavonoídico (NO=79) predominam os flavonóis com raras flavonas, além de ocorrência de catequinas, diidroflavonóis e proantocianidinas.

De modo geral, ocorre uma predominância de substâncias derivadas do ácido caféico. Quercetrina (3-O-ramnosilquercetina) encontra-se amplamente distribuída por diversos gêneros de Loranthaceae, sendo considerado o marcador quimiotaxonômico da família, de acordo com Tilney *et al.*, 1974.

Os parâmetros químicos de avanço evolutivo referentes à glicosilação, à metilação, à proteção total e à desproteção das hidroxilas flavonoídicas foram obtidos para cinco gêneros que apresentavam um número de ocorrências significativas, quais sejam *Scurrula*, *Taxillus*, *Loranthus*, *Ligaria* e *Amyema*.

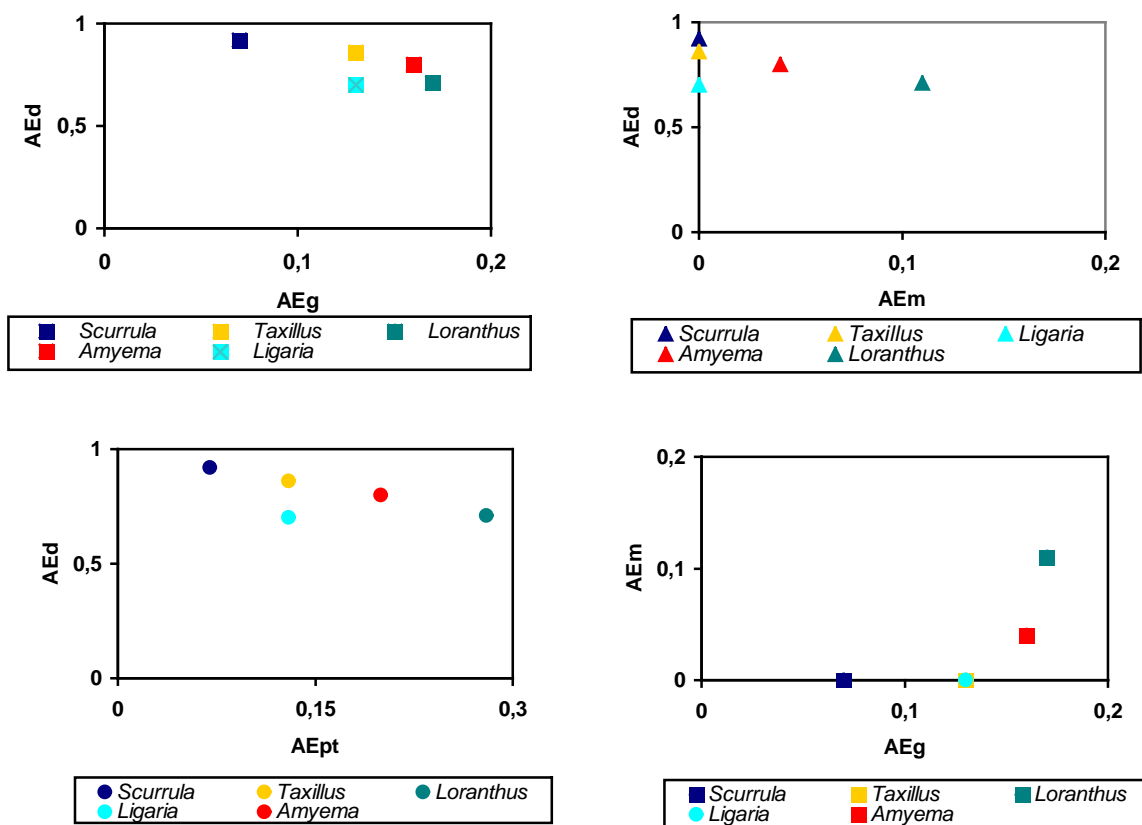


Figura 34. Correlação dos parâmetros de avanço evolutivo (AE_g , AE_m , AE_d e AE_{pt}) entre si na família Loranthaceae.

A análise dos resultados obtidos (Figura 34) mostra que a maioria das hidroxilas flavanoídicas encontra-se desprotegida. Entretanto, quando protegidas, a glicosilação parece ser o processo mais comum. No gênero *Loranthus*, a proteção das hidroxilas por metilação é um evento importante. Além disso, o táxon demonstra um certo equilíbrio entre os processos de glicosilação e metilação na proteção dessas hidroxilas. Entre os gêneros estudados, *Loranthus* apresenta um maior número de caracteres derivados, apesar da primitividade do grupo.

Loranthaceae caracteriza-se por congregar espécimes hemiparasitas. Muitas dessas espécies são parasitas generalistas, isto é, seus hospedeiros provêm de diversas famílias. Uma das conseqüências desse modo de nutrição é a possibilidade da transferência de metabólitos da planta hospedeira infectada para o parasita.

Um exemplo é a presença de mangiferina, uma xantona glicosilada produzida pela mangueira, *Mangifera indica* L. e encontrada em *Dendrothoe falcata* (L.F.) Ettingsh (Loranthaceae) (Jadhav *et al.*, 2005) (Figura 32). Lactonas norditerpênicas presentes no gênero *Ileostylus* são encontradas na família Podocarpaceae, rica nessas substâncias e comumente infectada por espécies daquele gênero.

A correlação dos parâmetros químicos de avanço evolutivo em relação aos flavonóides da família mostra uma tendência evolutiva dentro do grupo que parece não estar relacionada com o metabolismo micromolecular do hospedeiro e muito menos com a grande variedade das espécies parasitadas.

VISCACEAE

ASPECTOS BOTÂNICOS

A família Viscaceae (*sensu* DAHLGREN, 1980) abrange cerca de 480 espécies distribuídas por sete gêneros. São plantas de hábito arbustivo, hemiparasitas aéreas que se localizam principalmente nos trópicos (Figura 35), e se estendem por regiões temperadas do hemisfério norte (DEVKOTA *et al.*, 2005)

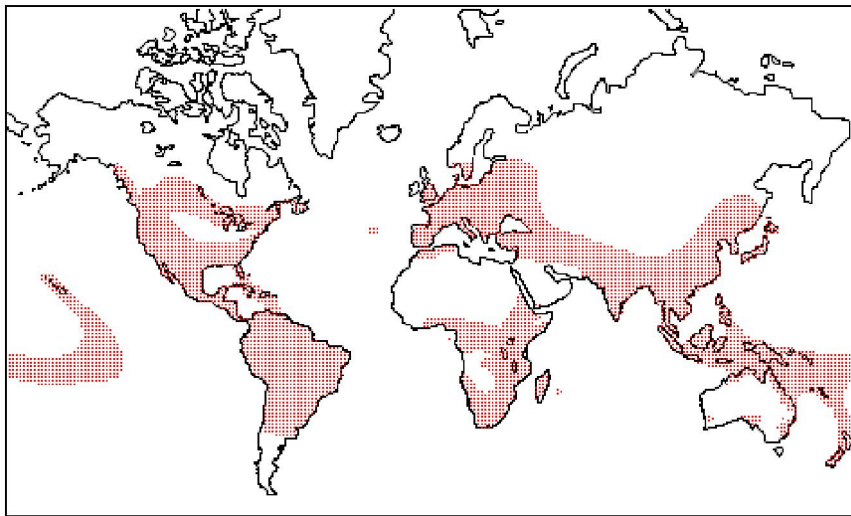


Figura 35. Distribuição de espécimes da família Viscaceae

Os gêneros com maior número de espécies são *Viscum* (65), cujas espécies se encontram no Velho Mundo (Figura 36) e *Phoradendron* (235), presentes no Novo Mundo (NICKRENT; MUSSELMAN, 2004). Espécies do gênero *Arceuthobium* (42), que parasitam coníferas de Pineaceae e Cupressaceae, distribuem-se por essas duas regiões. No México e Oeste dos Estados Unidos, encontram-se 34 espécies, enquanto que no Velho Mundo ocorrem oito espécies (HAWKSWORTH; WIENS, 1996). Caracteristicamente espécies desse gênero incorporam uma proporção muito pequena de carbono e por isso são muito

dependentes do hospedeiro para obtenção de carboidratos. Entretanto não podem ser consideradas holoparasitas porque durante seu desenvolvimento as plântulas fazem fotossíntese antes de se fixarem no hospedeiro (NICKRENT; MUSSELMAN, 2004).



Figura 36. Aspectos morfológicos de *Viscum album* L. (THOMÉ, 1885)

A família Viscaceae, tradicionalmente, é tratada como uma subfamília de Loranthaceae (DANSER, 1933). Entretanto Barlow (1964) a partir de estudos anatômicos, palinológicos, cariológicos e embriológicos defende a idéia de um táxon independente de Loranthaceae, elevando-o ao “status” de família.

Cronquist (1981), Thorne (1992) e Takhtajan (1997) consideram Viscaceae inserida na ordem Santalales. Por sua vez, o APG (2003) não reconhece o grupo como uma família e o inclui na família Santalaceae.

Takhtajan (1997) conforme disposto na (Tabela 11) distribuiu os gêneros da família por três tribos.

Tabela 11. Distribuição dos gêneros nas tribos da família Viscaceae (Takhtajan, 1997)

Tribo	Gênero
Phoradendreae	<i>Phoradendron</i> Nutt
	<i>Dendrophthora</i> Eichler
	<i>Korthalsella</i> Van tieghem
	<i>Ginjalloa</i> P. W. Korthals
Arceuthobieae	<i>Arceuthobium</i> Marschall
Visceae	<i>Notothixos</i> Oliver
	<i>Viscum</i> L.

PERFIL QUÍMICO

A família caracteriza-se pela presença de flavonóides, triterpenóides, alcalóides, lignanas, fenilpropanóides glicosilados, diarileptanóide, mucopolissacarídeos, lecitinas e tioninas. Foram encontradas 174 ocorrências de metabólitos especiais (Figura 37).

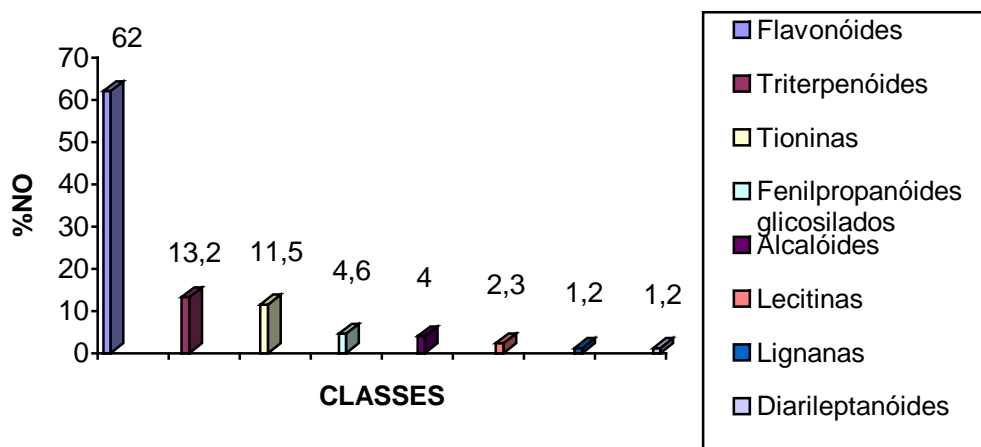


Figura 37. Percentagem do número de ocorrências (%NO) de metabólitos especiais em Viscaceae

Os flavonóides constituem o grupo de maior número de ocorrências de metabólitos especiais na família. Abrangem flavonóis, flavonas, flavanonas, chalconas e flavanas (Figura 38) e foram encontrados até o momento nos gêneros *Viscum*, *Arceuthobium*, *Phoradendron* e *Korthalsella* (Figura 39) (Tabelas 12, 13,14).

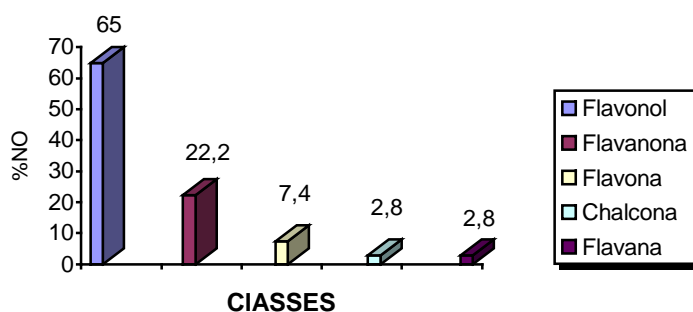


Figura 38. Percentagem do número de ocorrências (%NO) para os tipos flavonoídicos em Viscaceae.

No gênero *Arceuthobium* destacam-se os flavonóis com padrão de substituição do tipo O-glicosilação na posição 3. Glicosídeos e galactosídeos de quercetina e miricetina são os mais comuns, mas também ocorrem arabinosídeos e ramnosídeos. Não há registros até o momento de derivados do kaempferol no táxon.

Em *Viscum* encontram-se majoritariamente derivados metoxilados de quercetina e kaempferol. Nota-se também a presença de derivados monosubstituídos di-, tri- e tetraglicosilados, principalmente resíduos furanosídicos de apiose.

As flavonas constituem um número reduzido de ocorrências e estão restritas praticamente ao gênero *Phoradendron*. O gênero congrega caracteristicamente uma série de derivados C-glicosilados de apigenina, onde se encontram principalmente resíduos de glicose, mas também ocorrem resíduos de arabinose, galactose e xilose.

Em *Viscum*, as substâncias encontradas consistem em derivados apiosídicos e glicosídicos de luteolina.

Flavanonas e chalconas podem ser encontradas principalmente no gênero *Viscum*, onde a ocorrência de flavanonas é mais expressiva do que a de chalconas. Assim o equilíbrio químico no grupo encontra-se deslocado para a produção de flavanonas. Derivados glicosilados de homoeridictiol predominam no táxon com a presença importante de resíduos de apiose.

Tabela 12. Flavonóis em Viscaceae

Gênero	Espécie	Substância	Referência	
<i>Viscum</i>	<i>V. album</i> L.	Isorhamnetina	Lorch, 1993	
		Rhamnazina	Lorch, 1993	
		3-O- β -D-Rutinosilisorhamnetina	Fukunaga et al., 1988	
		3-O-[Apiosil(1 \rightarrow 6)]-glicosil-7-O-rhamnosilisorhamnetina	Fukunaga et al., 1988	
		3,4'-Di-O- β -D-Glicosilrhamnazina	Fukunaga et al., 1989	
		Flavoyadorinina A	Ohta et al., 1970	
		3-Metoxikaempferol	Haas et al., 2003	
		3,7-Dimetoxikaempferol	Haas et al., 2003	
		3,7-Dimetoxiquercetina	Haas et al., 2003	
		3,3'-Dimetoxiquercetina	Haas et al., 2003	
		3,7,3'-Trimetoxiquercetina	Haas et al., 2003	
		3,4'-Dimetoxikaempferol	Haas et al., 2003	
		7-Metoxiquercetina	Haas et al., 2003	
		7,3'-Dimetoxiquercetina	Haas et al., 2003	
		3-Metoxiquercetina	Haas et al., 2003	
		Kaempferol	Haas et al., 2003	
		Quercetina	Haas et al., 2003	
		<i>V. cruciatum</i>	Kaempferol	Haas et al., 2003
			7-Metoxikaempferol	Haas et al., 2003
			3,7-Dimetoxikaempferol	Haas et al., 2003
	Quercetina		Haas et al., 2003	
	7-Metoxiquercetina		Haas et al., 2003	
	3'-Metoxiquercetina		Haas et al., 2003	
	7,3'-Dimetoxiquercetina		Haas et al., 2003	
	3,7,3'-Trimetoxiquercetina		Haas et al., 2003	
	<i>V. angulatum</i>	3,7-Dimetoxiquercetina	Haas et al., 2003	
		3-O-Apiosil(1 \rightarrow 5)apiosil(1 \rightarrow 2)[α -L-rhamnosil(1 \rightarrow 6)]- β -D-glicosilrhamnocitrina	Lin et al., 2002	

Tabela 12. Cont.

<i>Gênero</i>	<i>Espécie</i>	Substância	Referência	
<i>Viscum</i>	<i>V. alniformosanae</i>	4'-O-β-D-[Apiosil(1→2)- Glicosilrhamnazina	Chou et al., 1999	
	<i>V. coloratum</i>	Viscumneosidio VII	Kong et al., 1990	
		Viscumneosidio IV	Kong et al., 1988b	
		3-O-β-D-Glicosilisorhamnetina	Kong et al., 1988a	
<i>Arceuthobium</i>	<i>A. abietis-religiosae</i>	7- O-β-D-Glicosil isorhamnetina	Kong et al., 1988a	
		3-O-Glicosilmiricetina	Crawford & Hawksworth, 1979	
		3-O-Rhamnosilmiricetina	Crawford & Hawksworth, 1979	
		3-O-Glicosilquercetina	Crawford & Hawksworth, 1979	
	<i>A. americanum</i>	3-O-Rhamnosilquercetina	Crawford & Hawksworth, 1979	
		3-O-Glicosilmiricetina	Crawford & Hawksworth, 1979	
		3-O-Galactosilquercetina	Crawford & Hawksworth, 1979	
	<i>A. azoricum</i>	3-O-Glicosilmiricetina	Crawford & Hawksworth, 1979	
		3-O-Galactosilquercetina	Crawford & Hawksworth, 1979	
		3-O-Glicosilquercetina	Crawford & Hawksworth, 1979	
	<i>A. juniperi-procerae</i>	3-O-Glicosilmiricetina	Crawford & Hawksworth, 1979	
		<i>A. minutissimum</i>	3-O-galactosilmiricetina	Crawford & Hawksworth, 1979
			3-O-Galactosilquercetina	Crawford & Hawksworth, 1979
	3-O-Glicosilquercetina		Crawford & Hawksworth, 1979	
	<i>A. oxycedri</i>	3-O-Glicosilmiricetina	Crawford & Hawksworth, 1979	
		<i>A. aureum</i>	3-O-Galactosilmiricetina	Crawford & Hawksworth, 1979
			3-O-Galactosilquercetina	Crawford & Hawksworth, 1979
	<i>A. gillii</i>	3-O-Glicosilmiricetina	Crawford & Hawksworth, 1979	
		3-O-Galactosilquercetina	Crawford & Hawksworth, 1979	
	<i>A. globosum</i>	3-O-Galactosilmiricetina	Crawford & Hawksworth, 1979	
3-O-Galactosilquercetina		Crawford & Hawksworth, 1979		
<i>A. vaginatum</i>	3-O-Galactosilmiricetina	Crawford & Hawksworth, 1979		
	3-O-Galactosilquercetina	Crawford & Hawksworth, 1979		
<i>A. abietinum</i>	3-O-Galactosilmiricetina	Crawford & Hawksworth, 1979		
<i>A. apachecum</i>	3-O-Galactosilmiricetina	Crawford & Hawksworth, 1979		

Tabela 12. Cont.

Gênero	Espécie	Substância	Referência
<i>Arceuthobium</i>		3-O-Galactosilquercetina	Crawford & Hawksworth, 1979
		3-O-Glicosilquercetina	Crawford & Hawksworth, 1979
		3-O-Arabinosilquercetina	Crawford & Hawksworth, 1979
<i>A. blumeri</i>		3-O-Galactosilmiricetina	Crawford & Hawksworth, 1979
		3-O-Galactosilquercetina	Crawford & Hawksworth, 1979
<i>A. californicum</i>		3-O-Glicosilmiricetina	Crawford & Hawksworth, 1979
		3-O-Galactosilquercetina	Crawford & Hawksworth, 1979
		3-O-Glicosilquercetina	Crawford & Hawksworth, 1979
<i>A. campylodum</i>		3-O-Galactosilmiricetina	Crawford & Hawksworth, 1979
		3-O-Galactosilquercetina	Crawford & Hawksworth, 1979
<i>A. cyanocarpum</i>		3-O-Galactosilmiricetina	Crawford & Hawksworth, 1979
		3-O-Galactosilquercetina	Crawford & Hawksworth, 1979
<i>A. divaricatum</i>		3-O-galactosilmiricetina	Crawford & Hawksworth, 1979
		3-O-Galactosilquercetina	Crawford & Hawksworth, 1979

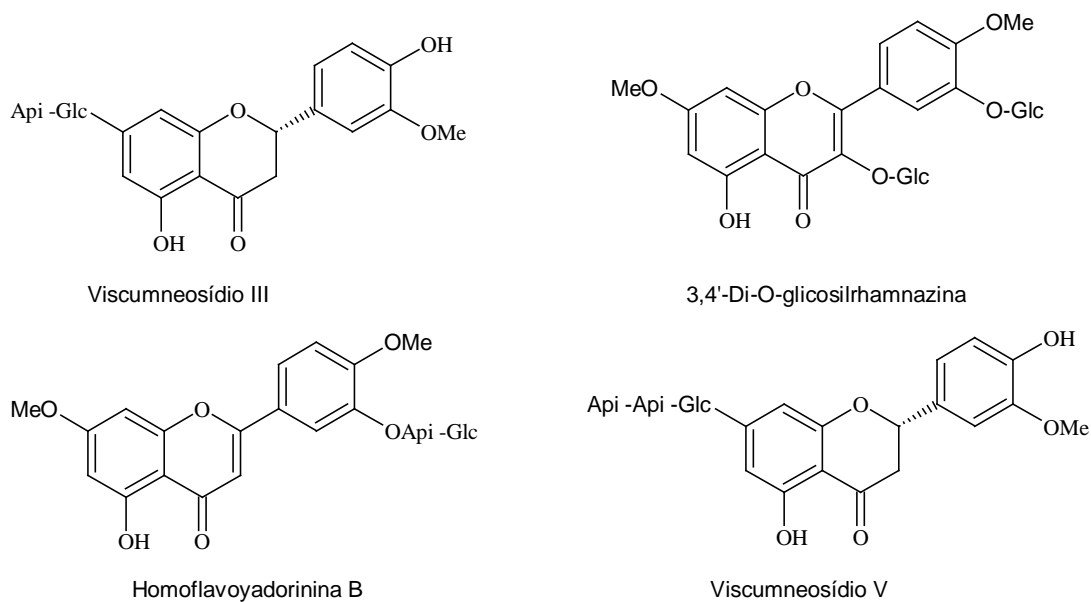


Figura 39. Exemplos de flavonóides de Viscaceae.

Tabela 13. Flavonas em Viscaceae

Gênero	Espécie	Substância	Referência
<i>Viscum</i>	<i>V. album</i>	Homoflavoyadorinina B	Choi et al., 2004
		Flavoyadorinina B	Ohta & Tagishita, 1970
<i>Phoradendron</i>	<i>P. tomentosum</i>	Apigenina	Dossaji et al., 1983
		Vitexina	Dossaji et al., 1983
		Schaftosídio	Dossaji et al., 1983
		Isoschaftosídio	Dossaji et al., 1983
	<i>P. liga</i>	4'-O-Glicosilapigenina	Dossaji et al., 1983
		6-C-Glicosilapigenina	Varela et al., 2004
		6-C-Galactosilapigenina	Varela et al., 2004
		8-C-Glicosilapigenina	Varela et al., 2004
<i>Korthalsella</i>	<i>K. japonica</i>	6-C-Xilosil-8-C-glicosiluteolina	Varela et al., 2004
		4'-O-Glicosilcrisoeriol	Fukunaga et al., 1989

Tabela 14. Flavanonas e chalconas em Viscaceae

Gênero	Espécie	Substância	Referência
<i>Viscum</i>	<i>V. album</i>	Homoeridictiol	Lorch, 1993
		5,7-Dimetoxi-4'-hidroxiflavanona	Lorch, 1993
		Sakuranetina	Lorch, 1993
		(2S)-7-O-Glicosilhomoeridictiol	Fukunaga et al., 1988
		Narigenina	Haas et al., 2003
		(2S)-7-O-[β-D-Apiosil(1→2)]-β-D-Glicosilhomoeridictiol	Fukunaga et al., 1989
		4'-O-[2"-O-(5'''-O-trans-Cinamoila)-β-D-piosil]-β-D-Glicosil-5,7-dimetoxiflavanona	Orhan et al., 2002

Tabela 14. Cont.

<i>Gênero</i>	<i>Espécie</i>	Substância	Referência
<i>Viscum</i>		4'-O-β-D-Glicosil-5,7-dimetoxiflavanona	Orhan et al., 2002
	<i>V. angulatum</i>	7-O-[β-D-Apiosil(1→5)apiosil(1→2)]-β-D-Glicosilpinocembrina	Lin et al., 2002
		Homoeridictiol	Lin et al., 2002
		Narigenina	Lin et al., 2002
		Viscumneosidio V	Lin et al., 2002
	<i>V. alniformosanae</i>	4'-O-[β-D-Apiosil(1→2)]glicosil-(2S)-5-hidroxi-7,3'-Dimetoxiflavanona	Chou et al., 1999
	<i>V. liquidambaricolum</i>	7-O-Glicosilpinocembrina	Liu, 1993
		7-O-Glicosilnarigenina	Liu, 1993
		7-O-Glicosileriodictiol	Liu, 1993
	<i>V. coloratum</i>	7-O-[β-D-Apiosil(1→2)]-β-D-Glicosilhomoeriodictiol	Kong et al., 1988a
<i>Viscum</i>	<i>V. coloratum</i>	7-O-[β-D-Apiosil(1→5)apiosil(1→2)]-β-D-Glicosilhomoeridictiol	Kong et al., 1988a
		7-O-β-D-(6"-O-Acetil)- Glicosilhomoeridictiol	Kong et al., 1988a
		Viscumneosídio III	Kong et al., 1988c
		Viscumneosidio V	Kong et al., 1988c
	<i>V. cruciatum</i>	Narigenina	Haas et al., 2003
<i>Phoradendron</i>	<i>P. coryae</i>	7-Metoxinarigenina	Domínguez et al. 1972
<i>Viscum</i>	<i>V. album</i>	4-O-β-D-Glicosil-2-'hidroxi-4',6'-Dimetoxichalcona	Choi et al., 2004
		4'-O-[β-D-Apiosil(1→2)]glicosil-2-'hidroxi-4',6'-Dimetoxichalcona	Choi et al., 2004
		4'-O-[2"-O-(5'''-O-trans-Cinamoila)-β-D- apiosil]-β-D-glicosil-2-'hidroxi-4',6'- Dimetoxichalcona	Orhan et al., 2002

Uma característica importante de Viscaceae é a ampla ocorrência de tioninas, polipeptídeos de baixo peso molecular contendo de 10 a 20% de resíduos de cisteína (KRUSE *at al.*, 2005) e que na família recebem diversas designações, segundo o gênero em que se encontram (Tabela 15). Apesar dessas substâncias serem produzidas pelo metabolismo primário, elas podem ser consideradas para propostas de posicionamento taxonômico de Viscaceae.

Esses polipeptídeos encontrados nas sementes são citotóxicos e presume-se que a sua função seja proteger o endosperma de infecções bacterianas durante a germinação. São também responsáveis pela maioria das atividades biológicas descritas para esse táxon. No gênero *Viscum*, essas substâncias são conhecidas como viscotoxinas e apresentam similaridades estruturais com as α - e β -tioninas de Gramineae, por exemplo (Ochocka; Piotrowski, 2002). As várias viscotoxinas, com 46 resíduos de ácidos aminados e três pontes dissulfeto constituem estruturas homólogas, pois, entre elas as seqüências de ácidos aminados diferem somente em alguns poucos resíduos. Foram encontradas também lecitinas denominadas de ML-I (viscumina), ML-II, ML-III e VisalbCBA.

Os polissacarídeos formam o visgo de alto poder adesivo das sementes de Viscaceae, conhecido como viscina. Esse revestimento permite que as sementes fiquem aderidas aos galhos da planta hospedeira após a deposição das mesmas pelos pássaros. É formada por uma mistura de polissacarídeos neutros e ácidos constituída de arabinogalactanas muito ramificadas em conjunto com xilanas e glicomananas (AZUMA; SAKAMOTO, 2003).

Os triterpenóides são encontrados nos gêneros *Viscum* e *Phoradendron* abrangendo lupanos, oleananos e ursanos. Alguns estão esterificados por ácido palmítico e esteárico na posição 3. Os alcalóides são do tipo bipiperidínicos (amodendrina) e quinolizidínicos (retamina e lupanina). No caso, esses alcalóides

Tabela 15. Peptídeos tóxicos em Viscaceae

<i>Gênero</i>	<i>Espécie</i>	Substância	Referência
<i>Viscum</i>	<i>V. album</i>	Viscotionina A1	Larsson, 2007
		Viscotionina A2 a	Larsson, 2007
		Viscotionina A2 b	Larsson, 2007
		Viscotionina A3 a	Larsson, 2007
		Viscotionina A3 b	Larsson, 2007
		Viscotionina B	Larsson, 2007
		Viscotionina C1	Larsson, 2007
		Viscotionina D	Larsson, 2007
		Viscotionina E	Larsson, 2007
		Viscotionina P1	Larsson, 2007
		Viscotoxina U-PS	Ochocka et al., 2002
<i>Phoradendron</i>	<i>P. liga</i>	Ligationina A	Larsson, 2007
		Ligationina B	Larsson, 2007
	<i>P. serotinum</i>	Phorationina A	Larsson, 2007
		Phorationina B	Larsson, 2007
		Phorationina C	Larsson, 2007
		Phorationina D	Larsson, 2007
		Phorationina E	Larsson, 2007
		Phorationina F	Larsson, 2007
<i>Dendrophthora</i>	<i>D. clavata</i>	Denclatoxina A	Samuelsson et al., 1977
		Denclatoxina B	Samuelsson et al., 1977

estão presentes em *Viscum cruciatum* cuja planta hospedeira *Retama sphaerocarpa* (Fabaceae), é rica nessas substâncias. Além desses, um alcalóide esteroideal denominado verazine está presente em *Viscum album* L..

Foi constatada a presença de fenilpropanóides glicosilados como, por exemplo, sirigina, coniferina e kalopanaxina. No gênero *Viscum*, as lignanas são eleuterósido E e mono-O-glucosilsiringaresinol. Os fenilpropanóides costumam estar eterificados por resíduos de glicose e apiose.

CONSIDERAÇÕES QUIOSSISTEMÁTICAS EM VISCACEAE

Os flavonóides são os metabólitos especiais com o maior número de ocorrências encontradas até o momento na família. Predominam os flavonóis, expresso pela relação $fo/fl=0,11$. Esse parâmetro mostra uma correlação entre a morfologia e diversidade química. Sendo assim, famílias mais primitivas, lenhosas apresentam valores que raramente ultrapassam 1 (SOARES *et al.*, 2001).

Foram obtidos os parâmetros químicos de avanço evolutivo (AEm, AEg, AEd, e AEpt) em relação às hidroxilas flavonoídicas de Viscaceae, sendo feita diversas correlações entre eles (Figura 40).

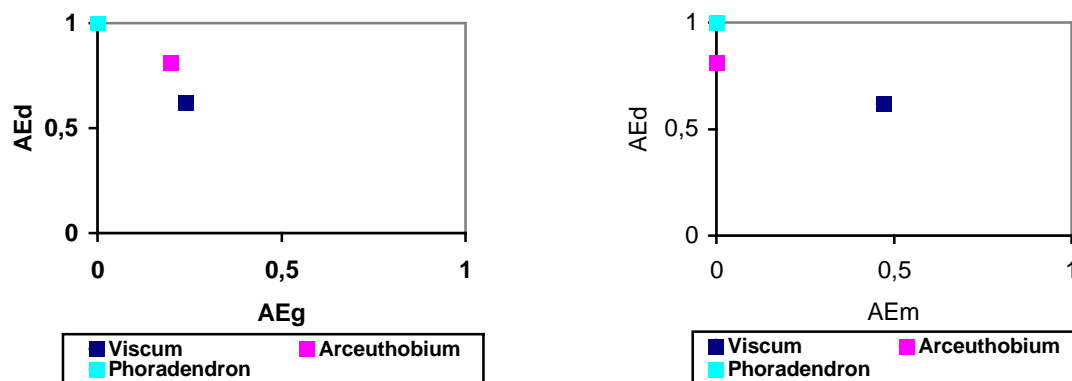


Figura 40. Correlação entre os diversos parâmetros químicos de avanço evolutivo em Viscaceae

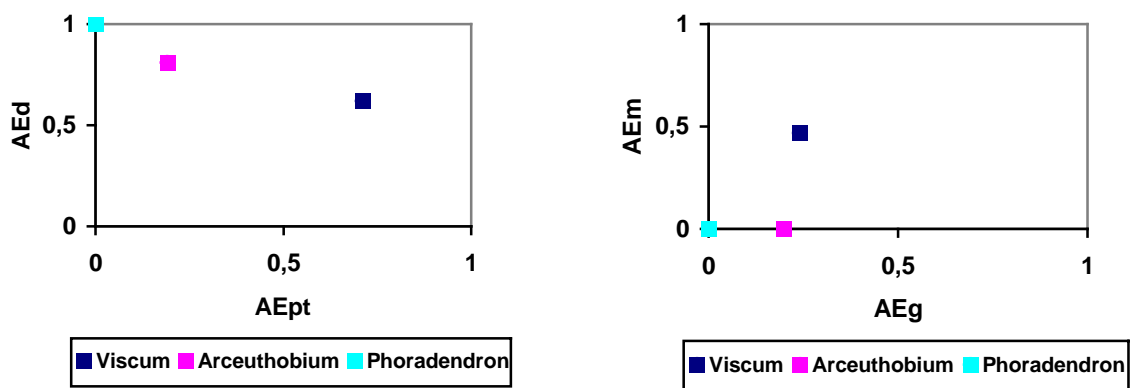


Figura 40. Correlação entre os diversos parâmetros químicos de avanço evolutivo em Viscaceae

Os gráficos demonstram que no gênero *Viscum*, a metilação é o principal mecanismo de proteção das hidroxilas flavonoídicas. Já em *Arceuthobium*, até o momento, só foram encontradas substâncias protegidas por glicosilação. Os flavonóides de *Viscum* são os mais protegidos dentre todos nos táxons estudados.

O perfil flavonoídico de Viscaceae difere substancialmente dos flavonóides de Loranthaceae, seja pelas presenças de kaempferol e miricetina, seja pela expressiva quantidade de resíduos de apiose, um furanosídeo. A presença destes açúcares constitui um marcador taxonômico para o gênero *Viscum*.

Um outro aspecto interessante é a presença de pinocembrina em *Viscum*, um metabólito-chave na biossíntese dos flavonóides. Como espécies do gênero *Viscum* infectam comumente espécies de *Pinus*, que são ricas em pinocembrina, pode-se imaginar a transferência dessa substância para a planta parasita. Por outro lado, nas espécies do gênero *Arceuthobium*, parasitas obrigatórios das famílias Pineaceae e Cupressaceae, não houve ainda uma única menção à presença de pinocembrina. Esses fatos permitem sugerir o seqüestro dessa substância do organismo hospedeiro.

De acordo com estudos filogenéticos baseados em dados moleculares, 18S rDNA e *rbcl* (HAWKSWORTH & WIENS, 1996), o gênero *Viscum* é considerado o táxon mais primitivo na família. Entretanto, a análise do perfil flavonoídico mostra características mais avançadas como a ausência de miricetina e um alto índice de metilação das hidroxilas flavonoídicas, apesar da predominância de flavonóis sobre flavonas.

Do ponto de vista filogenético, *Arceuthobium*, é um gênero pouco estudado, devido à dificuldade de utilizar os caracteres morfológicos nesse tipo de análise. Essa dificuldade advém do fato que as estruturas anatômicas ao longo da evolução sofreram um processo de redução. Conseqüentemente, as flores são diminutas, pouco vistosas e muito semelhantes entre si e as folhas estão ausentes (HAWKSWORTH; WIENS, 1996). Por isso, o posicionamento de *Arceuthobium* dentro da família não está bem definido.

Do ponto de vista químico, poucos estudos existem para o gênero, apesar de sua importância econômica e ecológica, principalmente na América do Norte. A presença de flavonóis 3-O-glicosilados de quercetina e miricetina demonstram uma característica primitiva do táxon.

SANTALACEAE

ASPECTOS BOTÂNICOS

Família de distribuição cosmopolita, Santalaceae (*sensu* DAHLGREN, 1980) ocorre em regiões tropicais e temperadas do mundo (Figura 41). Abrange cerca de 500 espécies em 37 gêneros (BRUMMIT, 1992). São plantas de hábito arbustivo e herbáceo, raramente arbóreo, hemiparasita de raiz, mas ocasionalmente hemiparasita aéreo como nos gêneros *Dendrotrophe* e *Phacellaria*.

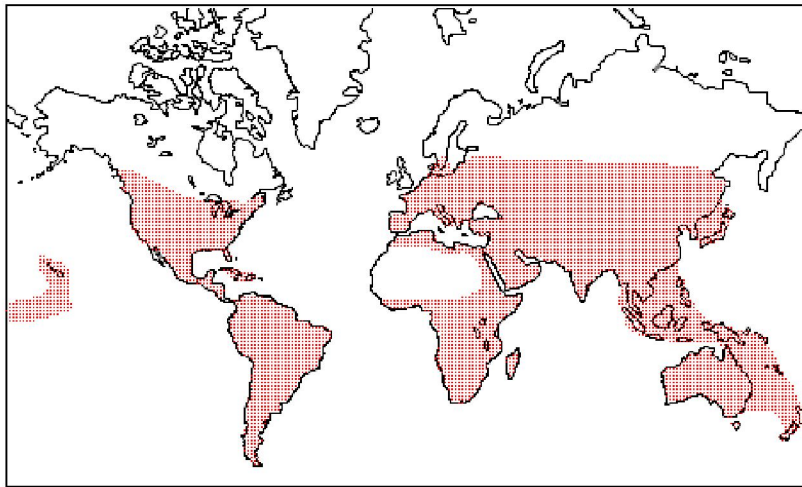


Figura 41. Distribuição das espécies de Santalaceae no mundo.

Na família ocorrem espécies de grande importância econômica como, por exemplo, *Santalum album* L. (sândalo) (Figura 42) empregado na indústria de perfumaria e cosmética, além de plantas de uso medicinal. Por outro lado, espécies do gênero *Thesium* podem causar grandes estragos na produção de grãos ao parasitar espécimes de *Triticum vulgare* Vill., por exemplo (FER *et al.*, 1993). Do ponto de vista taxonômico, a classificação subfamiliar de Pilger (1935 *apud* Nickrent; Franchina, 2002).



Figura 42. Aspectos morfológicos de *Santalum album* L. (KOEHLER, 1887).

Tabela 16. Tribos e gêneros de Santalaceae sensu Stauffer, 1969

Tribo	Gênero
Anthoboleae (Dumort.) Bartl. ex Spach	Anthobolus R. Brown Exocarpos Labill. Omphacomeria (Endl.) A. DC
Osyrideae Burnett	Acanthosyris (Eichler) Grisebach Buckleya J. Torrey Cervantesia Ruiz & Pav Colpoon Bergius Comandra Nuttall Darbya A. Gray (=Nestronia Raf.) Eucarya T.L.Mitch. Geocaulon Fernald Iodina Hook. & Arn. Ex Meisn. Mida Cunningham ex Endlicher Myoschilos Ruiz & Pav Nanodea Banks ex Gaertner Okoubaka Pellegr. & Normand Osyris L. Pyrularia A. Michaux Rhoiacarpos A. DC. Santalum L. Scleropyrum Arnott
Thesieae Meisn.	Arjona Cavanilles Osyridocarpus A. DC. Quinchamalium Molina Thesidium Sonder Thesium L.
Amphorogyneae	Amphorogyne Stauffer & Hurl Choretrum R.Br. Cladomyza Danser Daenikera Hurl. & Stauffer Dendromyza Danser Dendrotrophe Miquel Dufrenoya Chatin Leptomeria R. Br. Phacellaria Bentham

foi uma das primeiras a ser empregada e serviu como base para posteriores modificações e revisões mais recentes. Em um desses trabalhos, Stauffer (1969) adiciona mais uma tribo à lista de Pilger, *Amphorogyneae* que se destaca pela presença de hemiparasitas aéreos, quais sejam, *Dendromyza*, *Dendrotrophe*, *Dufrenoya* e *Phacellaria*.

PERFIL QUÍMICO

Ácidos graxos, flavonóides, alcalóides, glicosídeo cardiotônico, lignanas, cumarinas, triterpenóides, arilpropanóides, sesquiterpenóides e monoterpenóides constituem os metabólitos especiais encontrados na família até o momento (Figura 43; Figura 44).

Os ácidos graxos são em sua maioria derivados acetilênicos, destacando-se o ácido santálbico ou ximenínico.

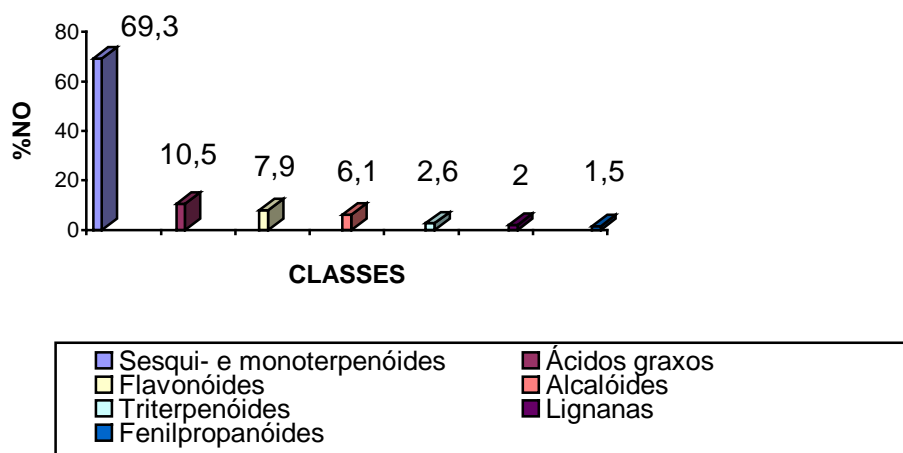
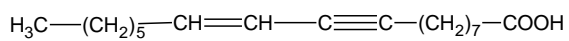
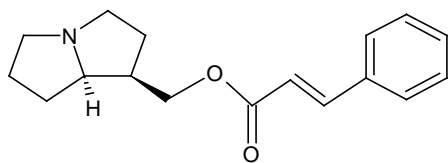


Figura 43. Percentagem do número de ocorrências (%NO) de metabólitos especiais em Santalaceae.

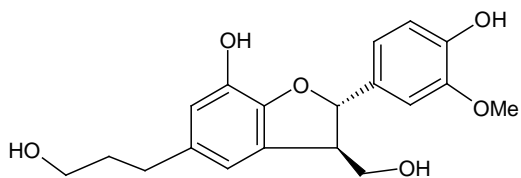
Poucas ocorrências de flavonóides foram encontradas até o momento e consistem em flavonóis, flavonas, flavanonas, flavans e catequinas. Os flavonóis são derivados glicosilados e metilados de quercetina, em sua grande maioria. As flavonas caracterizam-se por substâncias C-glicosiladas e O-glicosiladas de luteolina e apigenina.



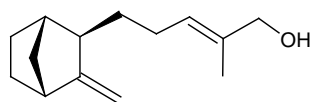
Ácido Santálbico



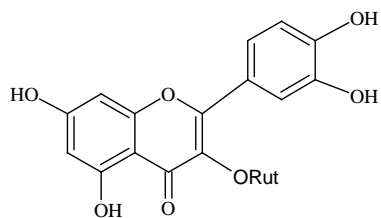
Thesinina



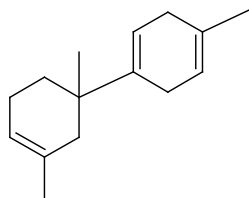
Cedrusina



β -Santalol



3-O-rutinosil-quercetina



Tenuifolona

Figura 44. Exemplos de metabólitos especiais em Santalaceae

Os alcalóides estão distribuídos por quatro gêneros: *Osyris*, *Thesium*, *Amphorogyne* e *Phacellaria*, sendo em sua grande maioria do tipo pirrolizidínico, mas ocorrendo alguns quinolizidínicos. Em *Thesium* ocorre um bufadienolídeo denominado thesiusídeo.

Entre as lignanas encontradas destaca-se cedrusina, muito comum no gênero *Pinus*. Os triterpenóides são escassos e consistem em triterpenos do tipo oleanano, ursano e lupano, muitas vezes esterificados por ácidos graxos de cadeia longa.

Há o registro da ocorrência de escopoletina, uma cumarina, em *Thesium* e *Phacellaria*. Os arilpropanóides presentes são derivados do ácido cinâmico e o ácido *p*-cumárico. Os sequi- e monoterpenos do óleo essencial constituem a principal classe de metabólitos presentes na família, sendo encontrados principalmente no gênero *Santalum*.

CONSIDERAÇÕES SOBRE A QUIMIOSSISTEMÁTICA DE SANTALACEAE

Foram encontradas 342 ocorrências de metabólitos especiais para a família com destaque para os ácidos graxos e constituintes do óleo essencial.

Os ácidos graxos acetilênicos com uma ou mais ligações olefínicas estão presentes em diversos gêneros da família.

No gênero *Acanthosyris* foi encontrada uma série de derivados C-8 hidroxilados com 17 átomos de carbono. Por sua vez, o gênero *Santalum* produz principalmente derivados acetilênicos de 18 átomos de carbonos, representados pelo ácido santálbico. Essa substância ocorre ainda em outros gêneros tais como *Comandra*, *Osyris*, *Leptomeria*, *Choretum*.

O gênero *Scleropyrum* exibe, além dos derivados acetilênicos, uma grande quantidade de ácidos graxos saturados e não-saturados olefínicos, como o ácido palmítico, láurico, esteárico, oléico, behênico, erúcico e outros.

Assim todas as tribos de Santalaceae segundo a classificação de Stauffer (1969) apresentam pelo menos um representante onde ocorrem ácidos graxos acetilênicos. Vários desses ácidos graxos estão presentes também em espécies de Olacaceae como o ácido *trans*-10-heptadecen-8-inóico (ácido pirúlico) em *Heisteria silvanii*, o ácido 13-octadecen-9,11-diinóico (ácido exocárpico) e principalmente o ácido santálbico ou ximenínico, que responde por cerca de 35% dos ácidos graxos presentes na semente de espécies de Santalaceae.

Sob o aspecto filogenético, Kuijt (1968, 1969, *apud* NICKRENT; FRANCHINA, 1990) sugere que a família Olacaceae é o grupo do qual derivou as outras famílias de Santalales, baseando-se em certos aspectos morfológicos e funcionais como, por exemplo, a presença tanto de formas hemiparasitas quanto de autotróficas (Figura 45).

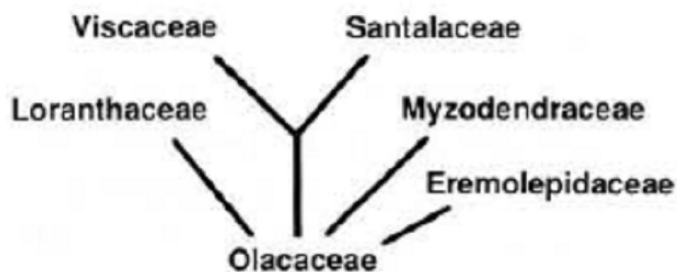


Figura 45. Relações entre as famílias da ordem Santalales Kuijt (1968,1969 *apud* NICKRENT; FRANCHINA, 1990).

Assim do ponto de vista químico, a presença de ácidos graxos acetilênicos em Santalaceae reforça a idéia que Santalaceae derivou de Olacaceae e colabora para a separação de Viscaceae.

A ocorrência de espécies produtoras de óleo essencial é uma outra característica de Santalaceae que até o momento, foi encontrado em várias espécies de *Santalum* e em *Osyris*. No gênero *Santalum*, o óleo de *Santalum album* L., da Índia apresenta grande valor comercial. Entretanto, outras espécies são exploradas comercialmente para a produção de óleo como *Santalum spicatum* (R. Br.) A. DC., do oeste australiano; *Santalum austrocaledonium* Vieill., da Nova Caledônia, *Santalum insulare* Bertero ex A. DC., da Polinésia Francesa e *Santalum yasi* Seem. de Fiji e Tonga.

A composição dos óleos abrange cerca de 90 % de sesquiterpenos e 10 % de monoterpenos, hidrocarbonetos, aldeídos e cetonas. Os principais componentes desses óleos são os álcoois sesquiterpênicos denominados de α -santalol e β -santalol, sendo os principais responsáveis pelo odor característico desses óleos e pelo seu valor comercial.

A espécie *Santalum album* L. apresenta concentrações maiores de α -santalol (46%) e β -santalol (20,4%). Por sua vez, *Santalum spicatum* (R. Br.) A. DC contém uma proporção maior de *E,E*-farnesol, α -bisabolol e α -bergamotol e menores concentrações de α -santalol (9,1%) e β -santalol (5,4%). Além disso, possui quantidades consideráveis de dendrolasina, um sesquiterpeno furânico, que não ocorre em *Santalum album* L.. Os hidrocarbonetos sesquiterpênicos majoritários são α -santaleno, β -santaleno e epi- β -santaleno que apresentam

concentrações maiores em *Santalum album* L. do que em *Santalum spicatum* (R. Br.) A. DC.

O gênero *Osyris* produz óleo essencial rico em acetosantalil (35%) e sanatol (32%). Digno de nota é a presença de sanatol também em *Santalum lanceolatum* R. Br., espécie que não produz santalol. Dessa maneira, os componentes do óleo essencial do gênero *Santalum* podem ser utilizados para caracterizar as diferentes espécies.

Na ordem Santalales, além de Santalaceae, Olacaceae é o único táxon que até o momento, apresenta espécies produtoras de óleo essencial. A composição do óleo essencial de espécies de Olacaceae se diferencia de Santalaceae pela riqueza nos monoterpenos α -pineno, β -pineno e canfeno, além de benzaldeído. A distribuição ubíqua de ácidos graxos acetilênicos e a presença importante dos constituintes do óleo essencial em ambos os *taxa* demonstra, do ponto de vista químico, a íntima correlação entre eles.

OPILIACEAE

ASPECTOS BOTÂNICOS

A família Opiliaceae (*sensu* Dalhgren, 1980) é formada por 10 gêneros com aproximadamente 33 espécies. São plantas de distribuição tropical e subtropical de hábito arbóreo e arbustivo com algumas lianas (Figura 46). Nos gêneros *Opilia* e *Cansjera* ocorrem espécimes hemiparasitas de raiz.

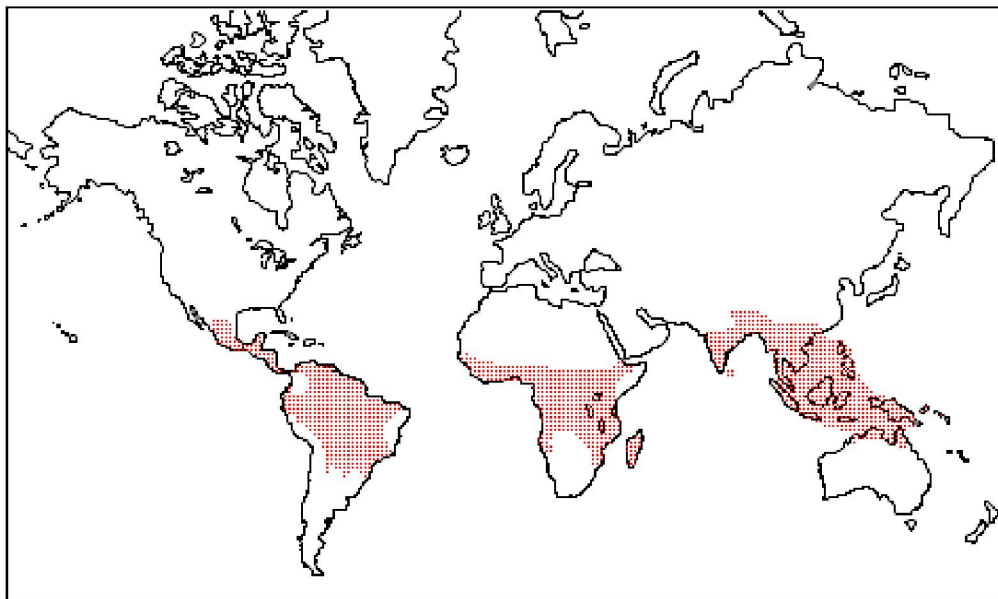


Figura 46. Distribuição das espécies de Opiliaceae

PERFIL QUÍMICO

Com poucos estudos até o momento, a família caracteriza-se pela presença de triterpenos e saponinas triterpenoídicas. Ocorrem até agora no gênero *Opilia* e pode-se destacar: silfiosídeo G, ácido gipogeninico, opigenina e glicosídeos de hederagenina. No gênero *Agonandra* foi encontrado um ácido graxo acetilênico.

MISODENDRACEAE

ASPECTOS BOTÂNICOS

A família Misodendraceae (*sensu* Dahlgren, 1980) apresenta um único gênero e oito espécies. São plantas de hábito arbustivo, hemiparasitas aéreas que se distribuem pelas regiões subantárticas e temperadas do oeste da América do Sul (Argentina e Chile) (Figura 47). São parasitas específicos, tendo como únicos hospedeiros, fagáceas do gênero *Nothofagus* (ARROIO-LEUENBERGER ; LEUENBERGER, 1998).

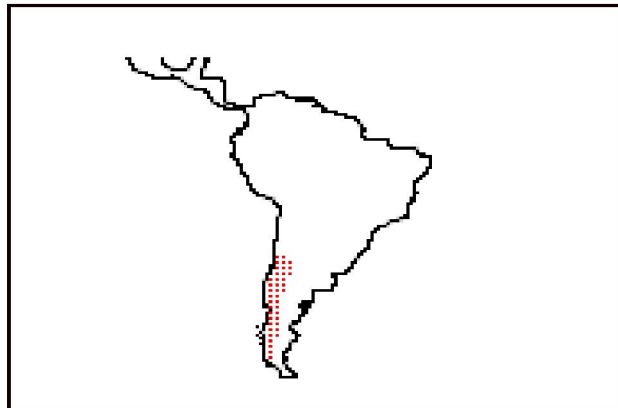


Figura 47. Distribuição de espécies de Misodendraceae

PERFIL QUÍMICO

Existem poucos estudos sobre a constituição química dessa família tendo sido encontrado até agora catequina e misodendrona, um arilpropanóide (DESMARCHELIER *et al.*, 2005).

EREMOLEPIDACEAE

ASPECTOS BOTÂNICOS

A família Eremolepidaceae (sensu Dahlgren, 1980) congrega três gêneros, *Antidaphne*, *Eremolepis* e *Eubrachion* com 14 espécies. São plantas de hábito arbustivo que se distribuem por regiões tropicais, principalmente na América do Sul. Muitas vezes, essa família é tratada como parte de Loranthaceae.

Do ponto de vista químico não foram encontrados registros químicos para a família.

ORDEM VITALES

A ordem Vitales (*sensu* Dahlgren, 1980) é formada por uma única família, Vitaceae.

VITACEAE

ASPECTOS BOTÂNICOS

A família Vitaceae (*sensu* Dahlgren, 1980) abrange 14 gêneros e cerca de 900 espécies. São plantas de distribuição pantropical e temperada (Figura 48) congregando trepadeiras, lianas, arbustos e pequenas árvores (SOEJIMA; WEN, 2006).



Figura 48. Distribuição das espécies da família Vitaceae

Dentre os gêneros de Vitaceae, *Vitis* e mais especificamente, a espécie *Vitis vinifera* L. (Figura 49) é muito importante economicamente, pois fornece uma bebida, o vinho, conhecido há mais de 7000 anos, sendo muito apreciado no mundo todo.

Além de *V. vinifera* L. de origem européia, têm-se também outras espécies produtoras de vinho como *V. labrusca* L., *V. riparia* Michx e *V. rotundifolia* Michx, todas de origem americana.

São conhecidas cerca de 5000 a 8000 variedades de *Vitis vinifera* que se diferenciam pela cor, tamanho, espessura da pele, acidez, aroma e rendimento na produção das uvas.



Figura 49. Aspectos morfológicos de *Vitis vinifera* L. (THOMÉ, 1885).

O gênero *Cissus* congrega cerca de 350 a 450 espécies de trepadeiras, sendo um dos maiores na família. No Brasil, a espécie *Cissus sycioides* L. é conhecida como anil trepador e no Sul como insulina, pois como o nome sugere, é empregada no tratamento de *Diabetes mellitus* tipo 2 (BELTRAME, 2001).

O posicionamento taxonômico de Vitaceae tem sido motivo de controvérsias. Alguns autores consideram Vitaceae formadas por duas subfamílias: Viticoideae e Leeoideae (APG, 2003). Entretanto, Takhtajan (1997) considera a ordem Vitales formada por duas famílias Vitaceae (Tabela 17) e Leeaceae. Cronquist (1981), por sua vez, posiciona Vitaceae em Rhamnales.

Tabela 17. Relação dos gêneros de Vitaceae segundo Takhtajan, 1997.

Família	Gêneros
Vitaceae Durande	Cissus L. Nothocissus (Miq.) Latiff Cyphostemma (Planch.) Alston Acareosperma Gagnep. Cayratia Juss. Vitis L. Ampelocissus Planch. Parthenocissus Planch. Ampelopsis Michx. Pterisanthes Blume Clematicissus Planch. Tetrastigma (Miq.) Planch. Rhoicissus Planch.

PERFIL QUÍMICO

A família caracteriza-se pela presença de flavonóides, estilbenóides, triterpenóides, alcalóides, arilpropanóides, lignanas, monoterpenos, norisoprenóides, ácidos benzóicos e ácido gálico.

Os flavonóides compreendem as antocianinas, os flavonóis glicosilados, as catequinas, as epicatequinas e os taninos condensados. O principal grupo de flavonóides encontrado em Vitaceae são os taninos condensados ou proantocianidinas. Essas substâncias encontram-se principalmente na forma polimérica. Por sua vez, as catequinas constituem uma pequena fração dos polifenóis. As maiores concentrações de taninos condensados encontram-se nas sementes.

As antocianinas de Vitaceae formam um grupo bem homogêneo. Foram encontrados monoglicosídeos e diglicosídeos de malvidina, peonidina, delphinidina, cianidina e petunidina. Muitas vezes as hidroxilas dos açúcares encontram-se esterificadas com grupos acetila e *p*-cumaroila, principalmente no gênero *Vitis*. Além disso, glicosídeos e os diglicosídeos de malvidina são as substâncias predominantes no gênero. Os flavonóis que ocorrem em Vitaceae são derivados glicosilados de quercetina e kaempferol, onde a presença de miricetina é rara. Flavonas, como por exemplo, luteolina e apigenina e derivados C-glicosilados estão presentes em *Cissus*.

Os estilbenóides abrangem estruturas monoméricas, diméricas, triméricas e tetraméricas, como por exemplo, resveratrol e seu derivado glicosilado, piceide. Além de ϵ -viniferina e balanocarpol, dímeros de resveratrol, viniferol D, um trímero e (+)-viniferol B, um tetrâmero.

No gênero *Cissus* foram encontrados alcalóides quinolizidínicos, além da ocorrência significativa de ácidos graxos em *Cissus quadrangularis* L. Foram registradas ainda duas cumarinas no gênero.

CONSIDERAÇÕES SOBRE A QUIMIOSSISTEMÁTICA DE VITACEAE

Em *Cissus*, as antocianinas mais freqüentes são os derivados glicosilados de delphinidina e cianidina, enquanto que em *Vitis* L. glicosídeos de malvidina são majoritários. Com relação aos açúcares, em *Vitis* L. predomina os derivados glucosilas enquanto que em *Cissus* temos os derivados ramnosilas. A presença de ácidos graxos e triterpenóides em *Cissus quadrangularis* L. o distingue de outras espécies do gênero.

ORDEM CELASTRALES

A ordem Celastrales é formada pelas famílias Celastraceae, Stackhousiaceae, Lophopyxidaceae, Cardiopteridaceae e Corynocarpaceae (sensu Dahlgren, 1980). Dentre essas, destaca-se a família Celastraceae, que de acordo com Dahlgren, inclui os gêneros da família Hippocrateaceae em uma classificação mais abrangente.

A família Stackhousiaceae congrega três gêneros - *Macgregoria*, *Stackhousia*, *Tripterooccus* – com 27 espécies e distribuição tropical e temperada, principalmente na Austrália, Nova Zelândia e Malásia. São espécies de hábito herbáceo. Não foram encontrados até o momento dados químicos para essa família.

A família Lophopyxidaceae é formada por um único gênero – *Lophopyxis* – com duas espécies de lianas e cuja distribuição está restrita ao arquipélago de Sonda na Malásia. Não foram encontrados ainda dados químicos para o táxon.

A Família Cardiopteridaceae é pantropical, compreendendo cinco gêneros - *Dendrobrangia*, *Citronella*, *Cardiopteris*, *Gonocaryum* e *Leptaulus* - e cerca de 50 espécies. São árvores ou lianas. De acordo com Dahlgren seu posicionamento na ordem Celastrales é incerto. Não apresenta registros de dados químicos

A família Corynocarpaceae é monogenérica – *Corynocarpus* - abrangendo cinco espécies de hábito arbóreo e arbustivo e de distribuição tropical principalmente na Malásia, Austrália e Nova Zelândia. A família também apresenta de acordo com Dahlgren, um posicionamento incerto em Celastrales. Foram encontrados alguns poucos flavonóides e registros de substâncias voláteis.

CELASTRACEAE

ASPECTOS BOTÂNICOS

A família Celastraceae (*sensu* Dahlgren 1980), abrange cerca de 55 gêneros e 850 espécies. São plantas de hábito arbustivo e arbóreo com algumas lianas. Apresenta distribuição pantropical e em regiões temperadas (SIMMONS; HEDIN, 1999) (Figura 50).

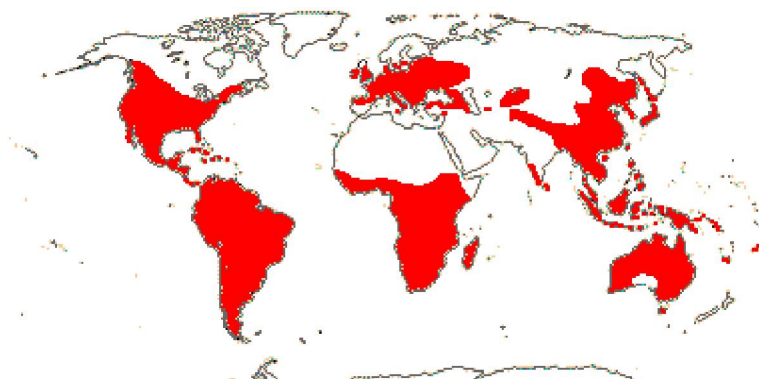


Figura 50. Distribuição das espécies de Celastraceae

Várias espécies são empregadas para fins medicinais, como por exemplo, *Maytenus ilicifolia* Mart.. Além disso, são utilizadas como plantas ornamentais, no caso de espécies dos gêneros *Celastrus*, *Paxistima* e *Euonymus* (Figura 51) e, como estimulante nas sociedades orientais, a *Catha edulis* L.



Figura 51. Aspectos anatômicos de *Euonymus europaeus* L. (THOMÉ, 1885)

Do ponto de vista taxonômico, a delimitação de Celastraceae é motivo de controvérsias. Para Hallé (1962), Hutchinson (1969) e Cronquist (1981), a família Hippocrateaceae deve ser tratada como um grupo distinto de Celastraceae. Por sua vez, Takhtajan (1980; 1997), Dahlgren (1983) e Thorne (1992) defendem a idéia de uma família unificada. Em sua classificação, Loesener (1942 a, *apud* SIMMONS *et al.*, 2001) mostra que Celastraceae *sensu strictu* é formada por cinco subfamílias e cinco tribos (Tabela 18).

Tabela 18. Subfamílias e tribos de Celastraceae *sensu strictu* (Loesener, 1942 a).

Família	Subfamília	Tribo
Celastraceae	Celastroideae	Euonymeae
		Celastreae
		Lophopetaleae
	Cassinoideae	Cassineae
		Perrottetieae

	Tripterygioideae	_____
	Goupioideae	_____
	Siphonodonoideae	_____

Hallé em 1962 define Hippocrateaceae, congregando duas subfamílias - Hippocrateoideae and Salacioideae (Tabela 19).

Tabela 19. Subfamílias e tribos de Hippocrateaceae (Hallé, 1962).

Família	Subfamília	Tribo
Hippocrateaceae	Hippocrateoideae	Campylostemonae
		Hippocrateae
	Salacioideae	Salaciae

Mais tarde, Hallé (1986) considera Celastraceae *sensu lato* formada por duas subfamílias, quais sejam, Celastroideae e Hippocratoideae, onde a última abrange quatro tribos (Tabela 20).

Tabela 20. Subfamília Hippocratoideae e suas tribos (Hallé, 1986).

Subfamília	Tribos
Hippocratoideae	Campylostemoneae
	Helictonemateae
	Hippocrateae
	Salaciae

PERFIL QUÍMICO

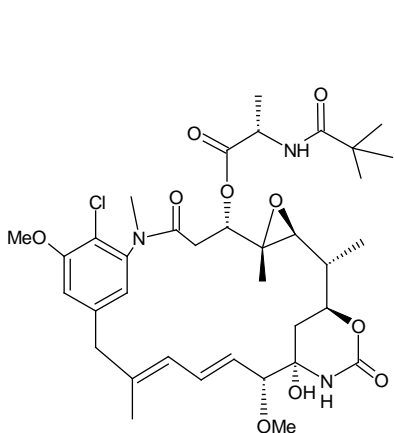
A família Celastraceae caracteriza-se pela produção de terpenóides, principalmente sesquiterpenos do tipo diidroagarofurano e seus alcalóides, triterpenóides dos tipos friedelano, lupano, oleanano e ursano, alcalóides espermidínicos, diterpenos, dímeros e trímeros de triterpenos e aductos de sesquiterpenos-triterpenos. Mas a característica mais proeminente do táxon é a produção de quinonametídeos, um tipo de nortriterpeno pertencente ao grupo dos D:A-friedo-nor-oleananos.

Os flavonóides presentes são catequinas, taninos condensados, e flavonóis. Os flavonóis consistem em sua maioria de derivados mono- e diglicosilados de quercetina e de poucos derivados glicosilados de kaempferol.

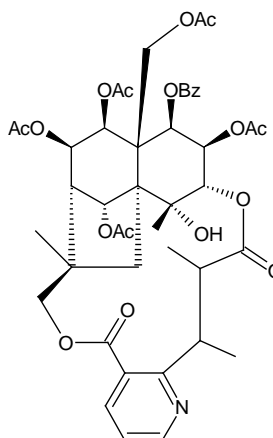
Os diterpenos são dos tipos ferruginol, caurano, abietano e totarol e ocorrem nos gêneros *Tripterigium* e *Maytenus* (Figura 52).

Os alcalóides diidroagarofuranos são ésteres de ácidos dicarboxílicos piridínicos com sesquiterpeno do tipo diidroagarofurano (Figura 52) e foram encontrados principalmente em *Euonymus* e *Celastrus*. Mas ocorrem também em

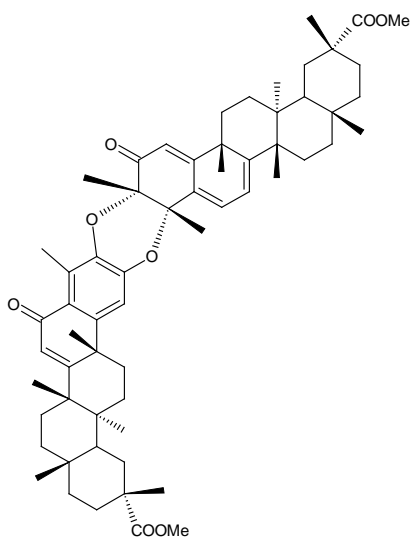
Catha, *Hipocratea*, *Peritassa* e *Acanthothamnus*. Celastraceae produz ainda estruturas do tipo ansa macrolídeo, os maitensinóides (Figura 52). São lactamas macrocíclicas com 19 átomos de carbono e ocorrem em diversos gêneros.



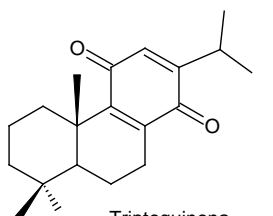
2'-N-desmetilmaitanbutina
(Maytensinóide)



Mayteína
(Alcalóide diidroagarofurano)



Scutidina α A
(Dimero de triterpeno quinonametideo)



Triptoquinona
(Diterpeno abietano)

Figura 52. Exemplos de metabólitos especiais em Celastraceae

CONSIDERAÇÕES QUIMIOSSISTEMÁTICAS DA FAMÍLIA CELASTRACEAE.

Foram encontradas 1.168 ocorrências de metabólitos especiais (Figura 53) para a família Celastraceae.

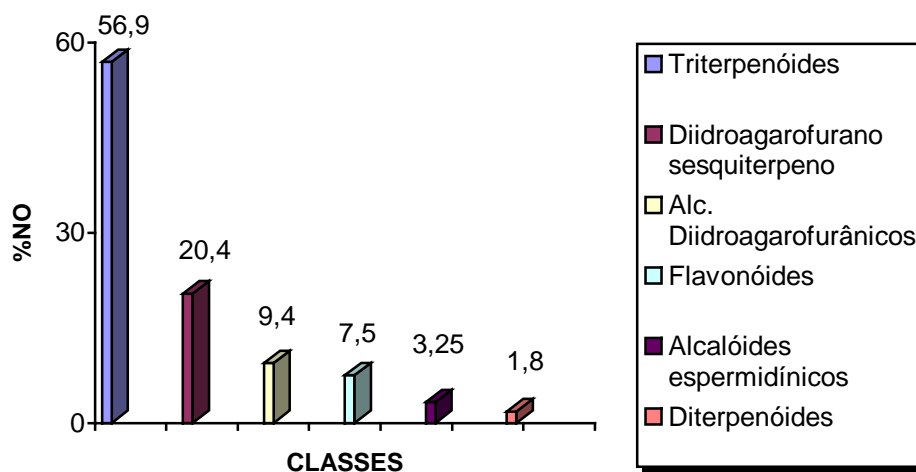


Figura 53. Percentagem de número ocorrências (%NO) para os metabólitos especiais de Celastraceae.

Os sesquiterpenos do tipo diidroagarofurano ocorrem em maior proporção nos gêneros *Maytenus* e *Celastrus* e por outro lado, os alcalóides piridínicos derivados dessas substâncias ocorrem mais em *Euonymus*. Certos ácidos são muito comuns na formação de ésteres no anel agarofurânico. Os mais comuns são o ácido benzóico, o ácido acético e o ácido nicotínico. Ocorrem ainda ésteres de ácido picolínico, butírico e furânico. Os alcalóides provêm principalmente do ácido dicarboxílico denominado evonínico.

Os triterpenóides presentes em Celastraceae constituem o grupo majoritário de metabólitos especiais na família. Dentre esses, os quinonametídeos destacam-se por estarem bem distribuídos na família e por terem notável atividade citotóxica.

São chamados também de “celastrolóides” por estarem restritos à ordem Celastrales.

A estrutura básica dessas substâncias é o núcleo 24-nor-D:A-friedooleanano. A partir de processos de oxidação em diversos pontos da molécula origina-se uma gama de substâncias. Por exemplo, o carbono da posição 29 do esqueleto triterpênico é o mais comumente oxidado a ácido carboxílico, entretanto ele é freqüentemente descarboxilado gerando os derivados 29-nor-D:A-friedooleanano.

Uma outra característica interessante dos quinonametídeos é a facilidade de se formarem dímeros e trímeros. Os dímeros só foram encontrados em cinco espécies até o momento: *Rzedowskia tolantonguensis* Medrano, *Maytenus ilicifolia* L., *Maytenus umbellata* (R.Br.) Mabb, *Maytenus chuchuhuasca* Raymond-Hamlet et Colas e *Maytenus scutioides* Lourteig & O'Donnell. A planta armazenaria essas substâncias para posteriormente serem liberadas sob a forma de unidades monoméricas biologicamente ativas, os *orto*-quinóides.

Os triterpenos de Celastraceae formam um grupo diversificado e bem distribuído, o que lhes confere a qualidade de marcador químico para a família. Devido à destacada ocorrência e importância dessas substâncias, os triterpenos foram escolhidos para a elaboração de um banco de dados no sistema especialista SISTEMAT utilizando o programa DATASIS.

Os tipos de esqueletos triterpenoídicos encontrados no táxon foram codificados e listados, conforme mostrado na Tabela 21 e Figura 54.

Tabela 21. Esqueletos dos triterpenos de Celastraceae

Tipo de esqueleto	Codigo
24, 29-D:A-friedo-dinor-oleanane	ESQ1
23, 24, 29-D:A-friedo-trinor-oleanane	ESQ2
25(9→8)-abeo-24, 29-D:A-friedo-dinor-oleanane	ESQ3
24-D:A-friedo-nor-oleanane	ESQ4
26(14→15)-abeo-24-D:A-friedo-nor-oleanane	ESQ5
D:A-friedo-oleanane	ESQ6
Lupane	ESQ7
Oleanane	ESQ8
25(9→8)-abeo-24-D:A-friedo-nor-oleanane	ESQ9
D:B-friedo-oleanane	ESQ10
3,4-seco-oleanane	ESQ11
Ursane	ESQ12
24, 30-D:A-friedo-dinor-oleanane	ESQ13
29-D:A-friedo-nor-oleanane	ESQ14
Dammarane	ESQ15
23, 24-D:A-friedo-dinor-oleanane	ESQ16
21(20→21)-abeo- 24, 29-D:A-friedo-dinor-oleanane	ESQ17
21-seco-24-D:A-friedo-nor-oleanane	ESQ18
21-seco-21, 24-D:A-friedo-dinor-oleanane	ESQ19
Arborane	ESQ20
Tirucallane	ESQ21
3,4-seco-ursane	ESQ22
26(14→15)-abeo-24, 29-D:A-friedo-dinor-oleanane	ESQ23
26(14→15)-abeo- 24, 30-D:A-friedo-dinor-oleanane	ESQ24
19(10→9)-abeo-euphane	ESQ25
25(9→8)-abeo-D:A-friedo-oleanane	ESQ26
Taraxerane	ESQ27
3, 4-seco-D:A-friedo-oleanane	ESQ28
Taraxane	ESQ29
3, 4 seco-23, 24, 29 -D:A-friedo-trinor-oleanane	ESQ30
25(9→11)-abeo-24 -D:A-friedo-nor-oleanane	ESQ31
2, 3 seco-3, 24-D:A-friedo-dinor-oleanane	ESQ32
Hopane	ESQ33
2,3 -seco-oleanane	ESQ34

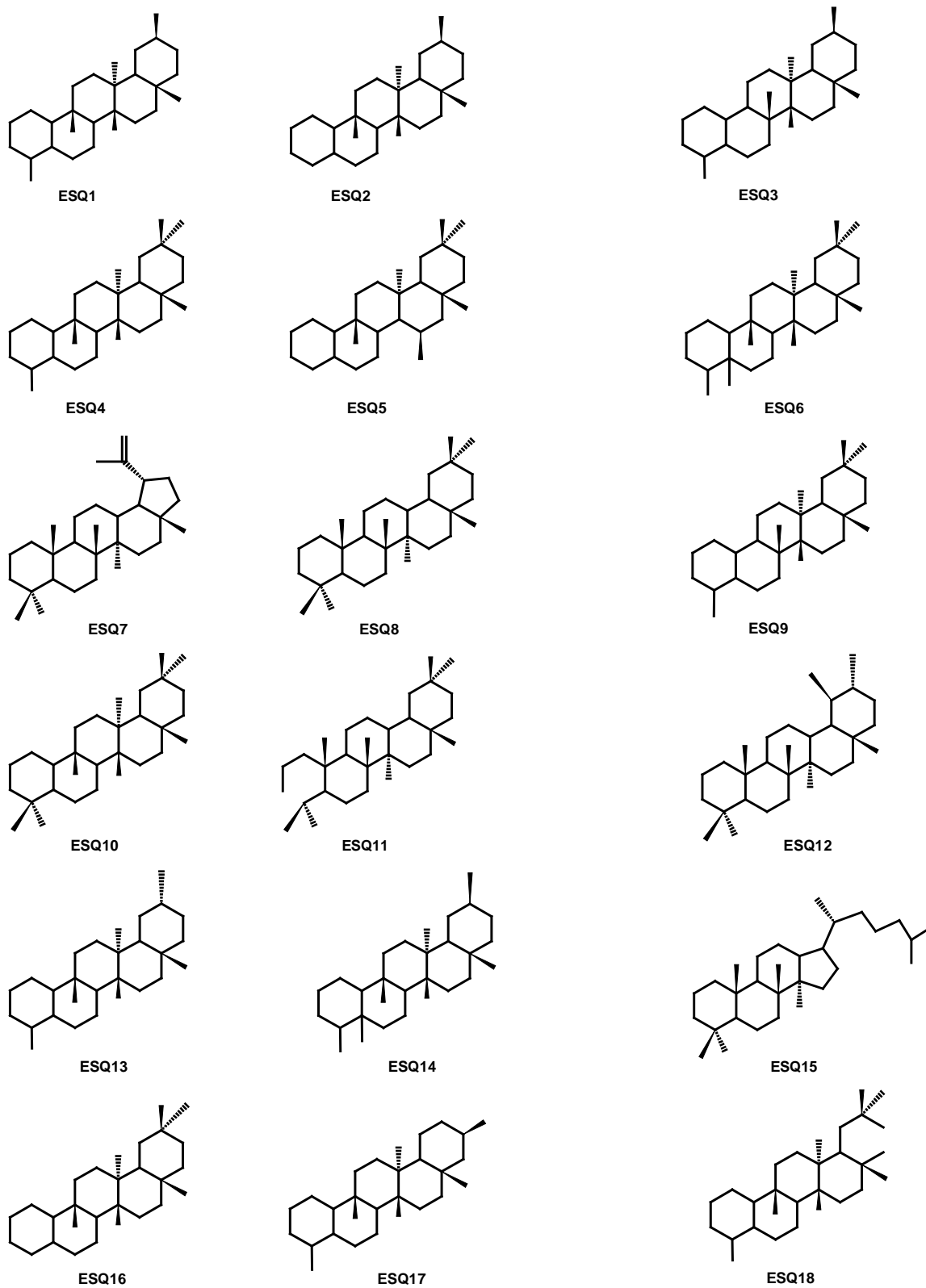
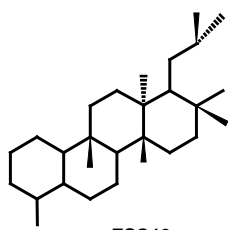
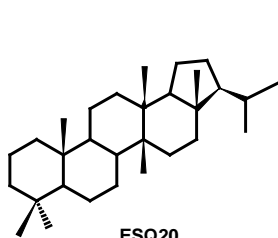


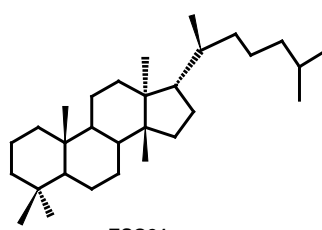
Figura 54. Tipos de esqueletos dos triterpenos de Celastraceae



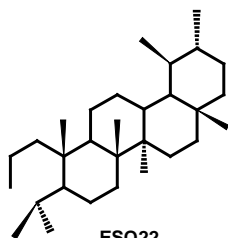
ESQ19



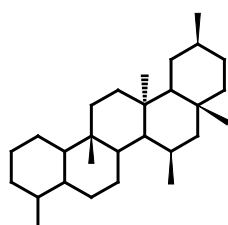
ESQ20



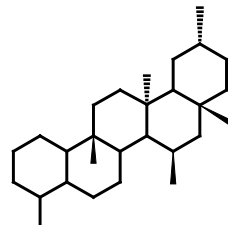
ESQ21



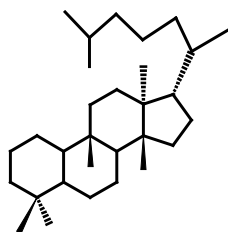
ESQ22



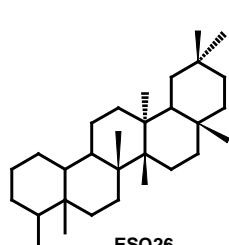
ESQ23



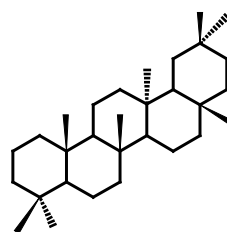
ESQ24



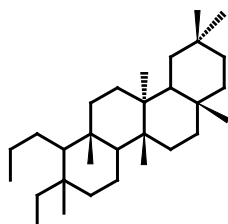
ESQ25



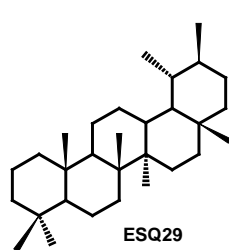
ESQ26



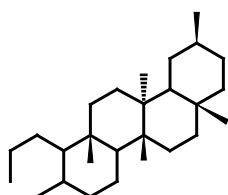
ESQ27



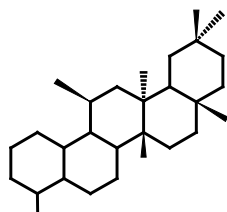
ESQ28



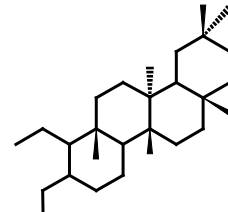
ESQ29



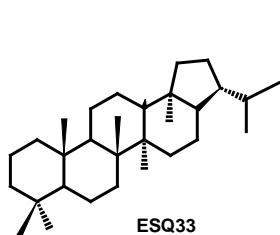
ESQ30



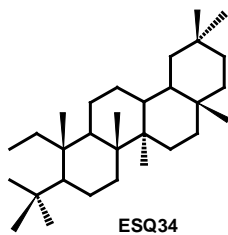
ESQ31



ESQ32



ESQ33



ESQ34

Figura 54. Continuação.

O número de ocorrências por gêneros dos tipos de esqueletos mais significativos é dado pela Tabela 22.

Tabela 22. Número de ocorrências por gênero dos tipos de esqueletos mais significativos em Celastraceae.

Gênero	Esq1	Esq2	Esq3	Esq4	Esq5	Esq6	Esq7	Esq8
<i>Maytenus</i>	43	2	2	26	2	43	59	31
<i>Salacia</i>	16	0	0	6	0	41	12	2
<i>Kokoona</i>	2	0	0	7	0	9	5	0
<i>Schaefferia</i>	1	0	0	1	0	1	0	6
<i>Cassine</i>	3	0	0	0	0	3	3	0
<i>Orthosphenia</i>	0	0	0	0	4	2	1	2
<i>Glyptopetalum</i>	6	0	0	0	0	1	0	0
<i>Prionostemma</i>	0	0	0	1	0	2	0	0
<i>Pachystima</i>	0	0	0	1	0	0	0	0
<i>Mortonia</i>	0	0	0	1	0	8	3	0
<i>Euonymus</i>	2	0	0	0	0	29	3	17
<i>Hippocratea</i>	1	0	0	3	0	4	3	1
<i>Pristimera</i>	0	0	0	0	0	7	0	1
<i>Reissantia</i>	1	0	0	4	0	4	0	3
<i>Gymnosporia</i>	1	0	0	1	0	3	3	6
<i>Acanthothamnus</i>	2	0	0	1	0	3	0	1
<i>Catha</i>	5	0	0	4	0	3	1	2
<i>Celastrus</i>	0	0	0	6	0	10	6	9
<i>Lophopetalum</i>	0	0	0	0	0	1	7	0
<i>Peritassa</i>	0	0	0	0	0	5	0	0
<i>Austroplenckia</i>	1	0	0	1	0	5	0	5
<i>Siphonodon</i>	0	0	0	1	0	8	0	0
<i>Bhesa</i>	0	0	0	0	0	0	0	0
<i>Crossopetalum</i>	1	0	0	4	0	1	0	0
<i>Rzedowskia</i>	1	0	0	1	2	0	0	0
<i>Cheiloclinium</i>	3	0	0	2	3	0	0	0
<i>Zinowiewia</i>	1	0	0	2	0	0	0	0
<i>Pleurostyliia</i>	0	0	0	1	0	2	7	0
<i>Elaeodendron</i>	0	0	0	0	1	8	2	0
<i>Tripterygium</i>	3	0	0	10	0	22	0	28

Tabela 22. Cont.

Gênero	Esq9	Esq10	Esq11	Esq12	Esq.13	Esq14	Esq.15
<i>Maytenus</i>	1	3	2	5	0	0	7
<i>Salacia</i>	0	0	0	1	3	1	0
<i>Kokoona</i>	0	0	0	0	0	0	0
<i>Schaefferia</i>	0	0	0	0	0	0	0
<i>Cassine</i>	0	0	0	0	0	0	0
<i>Orthosphenia</i>	0	0	0	0	0	0	0
<i>Glyptopetalum</i>	0	0	0	0	3	0	0
<i>Prionostemma</i>	0	0	0	0	0	0	0
<i>Pachystima</i>	0	0	0	0	0	0	0
<i>Mortonia</i>	0	0	0	0	0	0	0
<i>Euonymus</i>	1	0	0	0	0	0	0
<i>Hippocratea</i>	0	1	0	0	0	0	0
<i>Pristimera</i>	0	0	0	1	0	0	0
<i>Reissantia</i>	0	0	0	0	0	0	0
<i>Gymnosporia</i>	0	0	0	0	0	0	0
<i>Acanthothamnus</i>	0	0	0	0	0	0	0
<i>Catha</i>	0	0	0	0	0	0	0
<i>Celastrus</i>	0	0	0	0	0	0	0
<i>Lophopetalum</i>	0	0	0	0	0	0	0
<i>Peritassa</i>	0	0	0	0	0	0	0
<i>Austroplenckia</i>	0	0	0	0	0	0	0
<i>Siphonodon</i>	0	0	0	0	0	0	0
<i>Bhesa</i>	0	0	0	8	0	0	0
<i>Crossopetalum</i>	0	0	0	1	0	0	0
<i>Rzedowskia</i>	0	0	0	0	0	0	0
<i>Cheiloclinium</i>	0	0	0	0	0	0	0
<i>Zinowiewia</i>	0	0	0	0	0	0	0
<i>Pleurostylia</i>	0	0	0	0	0	0	0
<i>Elaeodendron</i>	0	1	0	0	0	0	0
<i>Tripterygium</i>	2	1	0	17	0	0	0

A Tabela 22 mostra a diversificação do tema triterpenoídico em *Salacia* da família Hipocrateaceae e *Maytenus* da família Celastraceae. Além disso, nesses gêneros está a maioria das ocorrências dos quinonametídeos.

A similaridade do perfil químico entre esses *taxa* sugere um certo grau de afinidade e corrobora os resultados obtidos a partir de estudos filogenéticos de que Hipocrateaceae encontra-se inserida em Celastraceae. Por sua vez, *Euonymus* produz mais triterpenos do tipo oleanano e friedelano e praticamente

não apresenta quinonametídeos, o que justifica o posicionamento em uma tribo distinta de *Maytenus* e *Celastrus*. A química triterpenoídica de *Celastrus* caracteriza-se pela presença de triterpenos com esqueleto friedelano, lupano e oleanano. Já o gênero *Tripterygium* produz majoritariamente triterpenos do tipo ursano e oleanano, além de alguns quinonametídeos.

Nas análises feitas com o SISTAX para os esqueletos dos triterpenos (Tabela 23) verificou-se que a subfamília Celastroideae é responsável por 49% das ocorrências de quinonametídeos, a subfamília Salacioideae é responsável por 20% e a subfamília Cassinoideae por 14,2%. Hippocrateaceae abrange 6,5 % das ocorrências de quinonametídeos enquanto que Tripterygioideae responde por 10%.

Tabela 23. Distribuição por tribos e subfamílias dos esqueletos mais significativos de triterpenos de Celastraceae.

Tribo	Sufamília	Esq.1	Esq.2	Esq.3	Esq.4	Esq.5	Esq.6	Esq.7	Esq.8
Cassineae	Cassinoideae	6	0	0	7	5	28	16	9
Celastreae	Celastroideae	49	2	2	38	2	59	69	48
Euonymaceae	Celastroideae	8	0	0	0	0	30	3	17
Hippocrateaceae		2	0	0	8	0	17	3	5
Lophopetalaceae	Celastroideae	3	0	0	8	2	10	12	0
Salaciae	Salacioideae	19	0	0	8	3	46	12	2
Descon		6	0	0	14	0	35	0	33
Total		93	2	2	83	12	225	115	114

Tabela 23. Cont.

Tribo	Sufamília	Esq.9	Esq.10	Esq.11	Esq.12	Esq.13	Esq.14	Esq.15
Cassineae	Cassinoideae	0	1	0	1	0	0	0
Celastreae	Celastroideae	1	3	2	13	0	0	7
Euonymaceae	Celastroideae	1	0	0	0	3	0	0
Hippocrateaceae		0	1	0	1	0	0	0
Lophopetalaceae	Celastroideae	0	0	0	0	0	0	0
Salaciae	Salacioideae	0	0	0	1	3	1	0
Descon		2	1	0	0	0	0	0
Total		4	6	2	33	6	1	7

Em Hippocrateaceae prevalece o tipo 24-nor-friedooleanano, indicando a ausência de descarboxilação do carbono 29.

Em Celastroideae prevalecem os triterpenos com esqueleto do tipo 24-nor-friedooleanano, porém quando ocorrem triterpenos do tipo 24,29-nor-friedooleanano, eles aparecem em *Maytenus*.

Com relação às subestruturas estudadas (Figura 55), os quinonametídeos que apresentam um grupo oxo na posição 21 do anel E (Figura 55, subestrutura 04) encontram-se principalmente nos gêneros *Maytenus*, *Euonymus* e *Salacia*, ocorrendo ainda em *Cassine*, *Orthosphenia* e *Rzedowskia*. Essas substâncias que apresentam o grupo oxo nessa posição, na maioria das vezes perdem o carbono 29 por descarboxilação. No entanto a 21-ceto pristimerina não é descarboxilada, devido à carboxila em 29 apresentar-se esterificada.

Moléculas que apresentam um grupo hidroxila em 21 e a carbonila em 22 do anel E (Figura 55, subestrutura 01) foram encontrados somente nos gêneros *Cassine*, *Rzedowskia* e *Orthosphenia*. As substâncias que apresentam uma carbonila na posição 6 do anel B (Figura 55, subestrutura 06) estão restritas ao gênero *Kokoona*. Desse modo eles podem ser considerados marcadores químicos para o táxon.

A subestrutura 05 é comum a todos os quinonametídeos da família e está presente principalmente nos gêneros *Maytenus* e *Salacia*. Os quinonametídeos que apresentam uma ligação dupla entre os carbonos 20 e 21 (Figura 55, subestrutura 02) foram encontrados em *Catha*, *Gymnosporia*, *Maytenus* e *Salacia*. Em *Maytenus* e *Salacia* está a maioria das ocorrências de quinonametídeos que

apresentam um grupamento carboxila no carbono 29 (Figura 55, subestrutura 3). O cálculo dos índices de oxidação e a determinação do parâmetro de avanço evolutivo em relação à oxidação dos triterpenos de Celastraceae mostraram que os gêneros *Maytenus* (AEo= -1,23) e *Salacia* (AEo= -1,27) apresentam estruturas mais oxigenadas, ou seja mais oxidadas sugerindo um posicionamento mais evoluído em Celastraceae.

A possibilidade de inferir relações taxonômicas utilizando o sistema especialista SISTEMAT é muito interessante, pois além de economizar tempo na elaboração e análise dos dados, as informações químicas e botânicas podem ser avaliadas em conjunto em uma mesma análise de modo mais acurado.

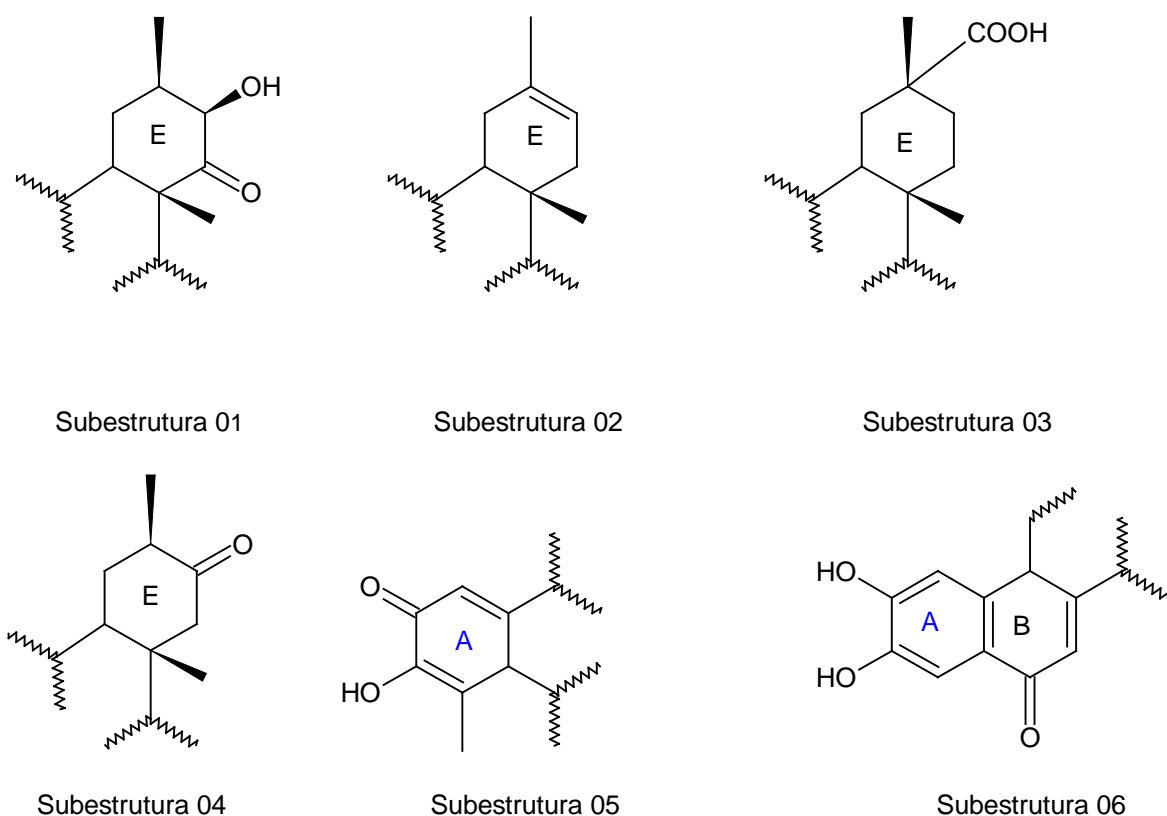


Figura 55. Subestruturas dos triterpenos do tipo quinonametideo

ANÁLISE DO POSICIONAMENTO DE RHIZOPHORACEAE *sensu* DAHLGREN 1989.

O sistema de Dahlgren, 1980 posiciona a família Rhizophoraceae em Myrtiflorae. Entretanto, o perfil químico da família não é condizente com a química micromolecular do resto da superordem. Rhizophoraceae apresenta diterpenos que não ocorrem em Myrtales, além de substâncias sulfatadas.

A família foi retirada de Myrtiflorae por Dahlgren e inserida na superordem Rutanae, próximo a Celastrales em 1989, baseado em aspectos morfológicos. Entretanto, esse posicionamento não é ainda o mais adequado para o táxon, pois apesar de ocorrerem substâncias sulfatadas, diterpenos, alcalóides e sesquiterpenos tanto em Rhizophoraceae quanto em Celastrales, o perfil químico de Celastraceae caracteriza-se pela presença ubíqua de triterpenos quinonametídeos, sesquiterpenos diidroagarofurano, alcalóides piridínicos e derivados ansa macrolídeos. Enquanto que em Rhizophoraceae ocorrem principalmente alcalóides pirrolizidínicos, pirrolidínicos e tropânicos além de alguns poucos sesquiterpenos do tipo germacrano.

Sendo assim, sugere-se reavaliar o posicionamento de Rhizophoraceae em Angiospermae à luz da quimiosistemática.

CONCLUSÕES

A Superordem Santaliflorae (*sensu* Dahlgren, 1980) abrange três ordens cujos perfis químicos são bem diferentes. A ordem Santalales abriga plantas, na grande maioria hemiparasitas, e sua química abrange desde ácidos graxos até lactonas sesquiterpênicas. A análise da química flavonoídica das famílias mais representativas da ordem mostrou considerável coerência com dados filogenéticos para os *taxa*.

Assim, Olacaceae é considerada o táxon basal da ordem de onde derivaram as outras famílias e expressa, na riqueza de ácidos graxos poliacetilênicos, uma relação estreita com Santalaceae. Os ácidos graxos poliacetilênicos foram encontrados até o momento em quase todas as tribos de Olacaceae, com exceção da tribo Anacoloseae. Em *Ongokea* e *Ximenia* ocorre uma série de derivados 8-hidroxilados que não são encontrados em outros gêneros da família. Já os alcalóides ciclopeptídicos e substâncias sulfuradas produzidas pelo gênero *Scorodocarpus* podem ser considerados marcadores químicos para esse grupo, pois em nenhum outro gênero da família registrou-se a ocorrência desses metabólitos. Mono- e sesquiterpenos compõem o óleo essencial de *Ximenia* da tribo Ximenieae e *Ptychopetalum* da tribo Olaceae, corroborando uma certa afinidade proposta por estudos filogenéticos. Além dos ácidos graxos poliacetilênicos um denominador comum às famílias Olacaceae e Santalaceae é a produção de óleo essencial, o que reforça a idéia de proximidade entre os dois *taxa*.

A família Viscaceae é considerada a mais evoluída dentro da ordem tanto do ponto de vista químico quanto morfológico e funcional. O perfil flavonoídico

bem como, as análises dos parâmetros químicos de avanço evolutivo mostram que a metilação é o principal mecanismo de proteção das hidroxilas flavonoídicas em *Viscum*, sendo que em *Arcethobium*, os flavonóides apresentam hidroxilas protegidas por glicosilação. O perfil flavonoídico de Viscaceae difere substancialmente dos flavonóides de Loranthaceae, seja pelas presenças de kaempferol e miricetina, seja pela expressiva quantidade de resíduos de apiose, um furanosídeo. A presença destes açúcares constitui um marcador taxonômico para o gênero *Viscum*.

Viscaceae que abrange somente espécimes hemiparasitas aéreos, embora sendo a família mais avançada da ordem, apresenta características de primitividade da Superordem com baixo índice fo/fl e alto índice de desproteção das hidroxilas flavonoídicas. A família Loranthaceae, até hoje, apresenta um posicionamento incerto, estando por vezes unida a Viscaceae. Nos últimos anos uma série de trabalhos, mormente na área da cladística, tem apontado para a independência dessas duas famílias.

Do ponto de vista da química flavonoídica, quercetrina (3-O-ramnosilquercetina) encontra-se amplamente distribuída por diversos gêneros de Loranthaceae, sendo considerado o marcador quimiotaxonômico da família, além disso, a análise dos resultados obtidos mostra que a maioria das hidroxilas flavonoídicas encontra-se desprotegidas. Entretanto, quando protegidas, a glicosilação parece ser o processo mais comum. No gênero *Loranthus*, a proteção das hidroxilas por metilação é um evento importante e o táxon demonstra um certo equilíbrio entre os processos de glicosilação e metilação na proteção dessas hidroxilas. Entre os gêneros estudados, *Loranthus* apresenta um maior número de

caracteres derivados, apesar da primitividade do grupo. Assim a química flavanoídica, corrobora a separação de Viscaceae com relação à Loranthaceae e contribui para a identificação de um ancestral comum.

A família Santalaceae é composta em sua grande maioria de espécimes hemiparasitas de raiz e caracteriza-se por plantas produtoras de óleo essencial além da presença de ácidos graxos poliacetilênicos de cadeia longa em diversos gêneros da família. Assim do ponto de vista químico, a presença de ácidos graxos acetilênicos em Santalaceae reforça a idéia que Santalaceae derivou de Olacaceae. Em relação à produção de óleos essenciais, a diversidade da composição química desses óleos no gênero *Santalum* pode ajudar na caracterização de diversas espécies.

A ordem de um modo geral apresenta características homogêneas tanto do ponto de vista químico quanto funcional.

Vitales é uma ordem que abriga uma única família, Vitaceae. São plantas trepadeiras e lianas, mas não parasitas. Seu perfil químico baseia-se nos flavonóides, com destaque para os taninos condensados, além da presença de estilbenóides. Em *Cissus*, as antocianinas mais freqüentes são os derivados glicosilados de delphinidina e cianidina, enquanto que em *Vitis* L. glicosídeos de malvidina são majoritários. Com relação aos açúcares, em *Vitis* L. predomina os derivados glucosilas enquanto que em *Cissus* temos os derivados ramnosilas. A presença de ácidos graxos e triterpenóides em *Cissus quadrangularis* L. o distingue de outras espécies do gênero.

Dahlgren (1989) considera que Vitales não se encontra bem posicionada em Santalales e a exclui de Santaliflorae, porém a conserva nas proximidades da superordem.

Celastrales mostrou ser formada pela família Celastraceae cuja delimitação tem sido objeto de controvérsias. Na opinião de alguns sistematas, a família Hippocrateaceae formaria um grupo distinto de Celastraceae.

Os triterpenóides presentes em Celastraceae constituem o grupo majoritário de metabólitos especiais na família. Dentre esses, os quinonametídeos destacam-se por estarem bem distribuídos na família e por terem notável atividade citotóxica. São chamados também de “celastrolóides” por estarem restritos à ordem Celastrales. A análise química realizada com os quinonametídeos permitiu concluir que essas substâncias podem ser consideradas os marcadores químicos para o táxon. Nos estudos feitos com o SISTAX do sistema especialista SISTEMAT para os esqueletos dos triterpenos verificou-se que a subfamília Celastroideae é responsável por 49% das ocorrências de quinonametídeos, a subfamília Salacioideae é responsável por 20% e a subfamília Cassinoideae por 14,2%. Hippocrateaceae abrange 6,5 % das ocorrências de quinonametídeos enquanto que Tripterygioideae responde por 10%. Em Hippocrateaceae prevalece o tipo 24-nor-friedooleanano, indicando a ausência de descarboxilação do carbono 29. Já em Celastroideae prevalecem os triterpenos com esqueleto do tipo 24-nor-friedooleanano, porém quando ocorrem triterpenos do tipo 24,29-nor-friedooleanano, eles aparecem em *Maytenus*.

Em relação aos índices de oxidação e a determinação do parâmetro de avanço evolutivo em relação à oxidação dos triterpenos de Celastraceae, os

gêneros *Maytenus* (AEo= -1,23) e *Salacia* (AEo= -1,27) apresentam estruturas mais oxigenadas, ou seja mais oxidadas sugerindo um posicionamento mais evoluído em Celastraceae.

Além disso, demonstrou-se o grande número de ocorrências de quinonametídeos dos tipos 24-nor-friedooleanano e 29, 24-dinor-friedooleanano no gênero *Maytenus* da família Celastraceae e no gênero *Salacia* da família Hippocrateaceae. Assim sendo, esses marcadores químicos evidenciam uma estreita correlação entre os dois *taxa*, permitindo propor a conservação de *Hippocrateae* e demais gêneros como gêneros de Celastraceae.

O sistema especialista SISTEMAT mostrou ser uma ferramenta importante tanto na organização dos dados como na otimização dos resultados obtidos.

A família Rhizophoraceae (*sensu* Dahlgren, 1989), foi retirada de Myrtiflorae e posicionada próxima a Celastrales na superordem Rutanae. Do ponto de vista químico, essa transposição não é adequada, pois apesar de ocorrerem substâncias sulfatadas, diterpenos, alcalóides e sesquiterpenos tanto em Rhizophoraceae quanto em Celastrales, o perfil químico de Celastraceae caracteriza-se pela presença ubíqua de triterpenos quinonametídeos, sesquiterpenos diidroagarofurano, alcalóides piridínicos e derivados ansa macrolídeos. Enquanto que em Rhizophoraceae ocorrem principalmente alcalóides pirrolizidínicos, pirrolidínicos e tropânicos além de poucos sesquiterpenos do tipo germacrano.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALVARENGA, S.A.V.; FERREIRA, M.J.P.; RODRIGUES, G.V.; EMERENCIANO, V.P. 2005. A general survey and some taxonomic implications of diterpenes in the Asteraceae. **Botanical Journal of the Linnean Society**, **147**, 291-301.

ALVARENGA, S.A.V.; GASTMANS, J.P.; FERREIRA, M.J.P.; RODRIGUES, G.V.; BRANT, A.J.C.; EMERENCIANO, V.P. 2003. SISTAX- An intelligent tool for recovering information on natural products chemistry. **Journal of the Brazilian Chemical Society**, **14**, 369-374.

ALVARENGA, S.A.V.; GASTMANS, J.P.; RODRIGUES, G.V.; MORENO, P.R.H.; EMERENCIANO, V.P. 2001. A Computer assisted approach for chemotaxonomic studies- diterpenes in Lamiaceae. **Phytochemistry**, **56**, 583-595.

APG. 2003. An update of the Angiosperm Phylogeny Group classification for the orders and families of flowering plants: APG II. **Botanical Journal of the Linnean Society**, **141**, 399-436.

ARROYO-LEUENBERGER, S.; LEUENBERGER, B.E. 1998. Type specimens of names in Misodendraceae at the Berlin-Dahlem herbarium (B). **Willdenowia**, **28**, 249-252.

AUKEMA, J.E. 2003. Vectors, viscin and Viscaceae: Mistletoes as parasites, mutualists and resources. **Frontiers in Ecology and Environment**, **1**, 212-219.

AZUMA, J.; SAKAMOTO, M. 2003. Cellulosic hydrocolloid system present in seed of plants. **Trends in Glycoscience and Glycotechnology**, **15**, 1-14.

BARKMAN, T J. 2001. Character coding of secondary chemical variation for use in cladistic analyses. **Biochemical Systematics and Ecology**, **29**, 1-20.

BARLOW, B.A. 1964. Classification of the Loranthaceae and Viscaceae. **Proceedings of the Linnean Society of New South Wales**, **89**, 268-272.

BELTRAME, F.L., SARTORETTO, J.L., BAZOTTE, R. B., CUMAN, R. N. E CORTEZ, D. A. G. 2001. Estudo fitoquímico e avaliação do potencial antidiabético do *Cissus sicyoides* L. (Vitaceae). **Química Nova**, **24**, 783-785.

BRETELER, J.F.; BAAS, P.; BOESEWINKEL, F.D.; BOUMAN, F.; LOBREAU-CALLEN, D. 1996. *Engomegoma* Breteler (Olacaceae) a new

monotypic genus from Gabon. **Botanische Jahrbücher für Systematik, Pflanzengeschichte und pflanzengeographie**, **118**, 113-132.

BRUMMIT, R.K. 1992. **Vascular Plant Families and Genera**. Kew: Royal Botanical Gardens. 804 p.

CARHART, R.E.; SMITH, D.H.; GRAY, N.A.B.; NOURSE, J.G.N. DJERASSI, C. 1981. Applications of artificial intelligence for chemical inference. 37. GENOA: a computer program for structure elucidation utilizing overlapping and alternative substructures. **Journal of Organic Chemistry**, **46**, 1708-1718.

CHANTARASANBOON, P.; YOSHIHIRA, K.; NATAI, S. 1974. Thai medicine plants. VII. Chemical and pharmacological studies on the constituents of *Loranthus pentandrus*. **Shoyakugaku Zasshi**, **28**, 7-14.

CHEN, J.; ZHANG, Y.; WANG, L.; SUCKECK, S.J.; SNOW, A.M.; HECHT, S.M. 1998. Inhibitors of DNA polymerase β from *Schoepfia californica*. **Chemical Communications (Cambridge)**, **24**, 2769-2770

CHOI, S.; CHUNG, S.; KIM, S.; YOO, Y.; LEE, K.; KIM, J.; SANG, K. 2004. An antioxidant homoflavoyadorinin B from Korean mistletoe (*Viscum album* var. *coloratum*). **Han'guk Eungyong Sangmyong Hwahakoeji**, **47**, 279-282.

CHOU, C.; KO, H.; LIN, L. 1999. Flavonoid glycosides from *Viscum alniformosanae*. **Journal of Natural Products**, **62**, 1421-1422.

CRAWFORD, D.J.& HAWKSWORTH, F.G. 1979. Flavonoid chemistry of *Arceuthobium* (Viscaceae). **Brittonia**, **31**, 212-216.

CRUZ, A.V.M. 2002. **Quimiosistemática da Superordem Myrtiflorae: Subsídios para o Estudo de Tendências Evolutivas**. Dissertação de mestrado, Núcleo de Pesquisas de Produtos Naturais, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 140 f.

CRONQUIST, A. 1981. **An integrated system of classification of flowering plants**. New York: Columbia University Press. 1262 pp.

DAHLGREN, G. 1989. An update angiosperm classification. **Botanical Journal of the Linnean Society**, **100**, 197-291.

DAHLGREN, R. 1988. Rhizophoraceae and Anisophylleaceae: summary statement and relationships. **Annals of the Missouri Botanical Garden**, **75**, 1259-1277.

DAHLGREN, R. 1983. General aspects of angiosperm evolution and macrosystematics. **Nordic Journal of Botany**, **3**, 119-149.

DAHLGREN, R. 1980. A revised system of classification of the angiosperms. **Botanical Journal of The Linnean Society**, **80**, 91-124.

DANSER, B.H. 1933. A new system for the genera of Loranthaceae Loranthoideae, with a nomenclator for the Old World species of this subfamily. **Verhandelingen der Koninklijke Akademie van Wetenschappen te Amsterdam Afdeling Natuurkunde, section 2**, **29**, 1-128

DESMARCHELIER, C.; PACCIARONI, A.V.; ABATE-DAGA, D.; COUSSIO, J.; GIL, R.R.; SILVA, G.L. 2005. Antioxidant and free radical scavenging activities of *Misodendrum punctulatum*, mysodendrone and structurally related phenols. **Phytotherapy Research**, **19**, 1043-1047.

DEVKOTA, M.P. 2005. Biology of mistletoes and their status in Nepal Himalaya. **Himalayan Journal of Science**, **3**, 85-88.

DJERASSI, C.; SMITH, D.H.; CRANDELL, C.W.; GRAY, N.A.B.; NOURSE, J.G.; LINDLEY, M.R. 1982. The Dendral Project: computational aids to natural products structure elucidation. **Pure and Applied Chemistry**, **54**, 2425-2442.

DOMINGUEZ, X.A.; ARMAS, B.E.; JAUREGUI, F. 1972. Chemical study of *Phoradendrum coryae*. **Revista Latinoamericana de Quimica**, **3**, 28-30.

DOSSAJI, S. F.; BECKER, H.; EXNER, J. 1983. Flavone C-glycosides of *Phoradendron tomentosum* from different host trees. **Phytochemistry**, **22**, 311-312.

DOWNEY, P.O. 1998. An inventory of hosts species for each aerial mistletoe (Loranthaceae and Viscaceae) in Australia. **Cunninghamia**, **5**, 685-720.

DUNSTAN, C.A.; NESZMELYI, A.; HOLLY, S.; WIEDERMANN, B.; NENNINGER, A.; TORSSELL, K.B.G.; BOHLIN, L.; WAGNER, H. 1998. New acetylenes from the bark of *Heisteria acuminata*. **Journal of Natural Products**, **61**, 422-427.

EL-SEEDI, H.R.; HAZELL, A.C.; TORSSELL, K.B.G. 1994. Triterpenes, lichexanthone and an acetylenic acid from *Minquartia guianensis*. **Phytochemistry**, **35**, 1297-1299.

EMERENCIANO, V.P.; RODRIGUES, G.V.; GASTMANS, J.P. 1993. Um método de codificação semi-automático assistido por computador para o SISTEMAT. **Química Nova**, **16**, 431-434.

ENGLER, A. 1897. Olacaceae *In* **Natürlichen Pflanzenfamilien Nachträge zu teil II-IV**. Eds. A. Engler & K. Prantl. Berlin:Borntraeger.

FER, A.; SIMIER, P.; ARNAUD, M.C.; REY, L.; RENAUDIN, S. 1993. Carbon acquisition and metabolism in a root hemiparasitic angiosperm, *Thesium humile* (Santalaceae) growing on wheat (*Triticum vulgare*). *Australian Journal of Plant Physiology*, **20**, 15 – 24.

FERNANDEZ, T.; WAGNER, M.L.; VARELA, B.G.; RICCO, R.A.; HAJOS, S.E.; GURNI, A.A.; ALVAREZ, E. 1998. Study on Argentine mistletoe, the hemiparasite *Ligaria cuneifolia* (R. & P.) Tiegh. (Loranthaceae). **Journal of Ethnopharmacology**, **62**, 25-34

FERREIRA, M.J.P. 2003. **Esteróides: análise espectral, geração de estruturas e simulação de dados de RMN ¹³C**. Tese de doutorado em Química Orgânica, IQ- USP. 307pp.

FORT, D.M.; KING, S.R.; CARLSON, T.J.; NELSON, S.T. 2000. Minquartynoic acid from *Coula edulis*. **Biochemical Systematics and Ecology**, **28**, 489-490.

FUKUNAGA, T.; KAJIKAWA, I.; NISHIYA, K.; WATANABE, Y.; SUZUKI, N.; TAKAYA, K.; ITAKAWA, H. 1988. Studies on the constituents of the European mistletoe, *Viscum album* L. II. **Chemical and Pharmaceutical Bulletin**, **36**, 1185-1189.

FUKUNAGA, T.; KAJKAWA, I.; NISHIYA, K.; TAKEYA, K.; ITOKAWA, H. 1989. Studies on the constituents of the japanese mistle toe *Viscum album* var. *coloratum* Ohwi grown on different host trees. **Chemical and Pharmaceutical Bulletin**, **37**, 1300-1303.

GARIBALDI, E.; MASCETTI, D.; GALLI, G.; CABALLION, P.; BOSÍSIO, E. 1998. LC-UV-electrospray-MS-mass spectrometry analysis of plant constituents inhibiting xanthine oxidase. **Pharmaceutical Research**, **15**, 936-943.

GASTMANS, J.P.; FURLAN, M.; LOPES, M.N.; BORGES, J.H.G.; EMERENCIANO, V.P. 1990a. A inteligência artificial aplicada à química de produtos naturais. O programa SISTEMAT. Parte I - Bases teóricas. **Química Nova**, **13**, 10-16.

GASTMANS, J.P.; FURLAN, M.; LOPES, M.N.; BORGES, J.H.G.; EMERENCIANO, V.P. 1990b. A inteligência artificial aplicada à química de produtos naturais. O programa SISTEMAT. Parte II – Organização do programa e aplicativos. **Química Nova**, **13**, 75-80.

GIULIETTI, A.M.; HARLEY, R.M.; QUEIROZ, L.P.; WANDERLEY, M.G.L.; VAN DEN BERG, C. 2005. Biodiversidade e conservação das plantas no Brasil. **Megadiversidade**, **1**, 52-61.

GOTTLIEB, O.R.; KAPLAN, M.A.C.; BORIN, M.R. 1996. **Biodiversidade. Um Enfoque Químico-Biológico**. Rio de Janeiro: Editora UFRJ. 268 p.

GOTTLIEB, O.R. 1982. Only science will reveal the full potentialities of medicinal plants. **World Health Forum**, **3**, 14-16.

GRAZIANO, M.M.; WIDMER, G.A.; JULIANI, R.; COUSSIO, J.D. 1967. Flavonoids from the argentine mistletoe, *Psittacanthus cuneifolius*. **Phytochemistry**, **6**, 1709.

HAAS, K.; BAUER, M.; WOLLENWEBER, E. 2003. Cuticular waxes and flavonol aglycons of mistletoes. **Zeitschrift fuer Naturforschung, C: Journal of Biosciences**, **58**, 464-470.

HALLE, N. 1986. **Celastraceae Hippocrateoideae**. In P. Morat [ed.], Flore du Gabon: (avec compléments pour d'autres pays d'Afrique et Madagascar), 29, 1–287. Muséum National d'Histoire Naturelle, Laboratoire de Phanérogamie, Paris, France

HALLÉ, N. 1962. Monographie des Hippocratéacées d'Afrique occidentale. **Mémoire de l'Institut Français de l'Afrique Noire**, **64**, 1-245.

HARBORNE, J.B. 2000. Arsenal for survival: secondary plant products. **Taxon**, **49**, 435-447.

HARBORNE, J.B.; TURNER, B.L. 1984. **Plant Chemosystematics**. Londres: Academic Press. 562 p.

HARVALA, E.; EXNER, J.; BECKER, H. 1984. Flavonoids of *Loranthus europaeus*. **Journal of Natural Products**, **47**, 1054-5.

HUTCHINSON, J. 1969. **Evolution and Phylogeny of Flowering Plants: Dicotyledons: Facts and theory with over 550 illustrations and maps by author**. Academic Press, London.

HAWKSWORTH, F.G. & WIENS, D. 1996. **Dwarf Mistletoes: Biology, pathology and systematics**. USDA, Forest Service, Agriculture Handbook nº 709, Washington DC.

INDRANI, N. & BALASUBRAMANIAN, K. 1985. Studies on *Loranthus longiflorus* Desr. Tannins- part II. **Leather Science (Madras)**, **32**, 206-208.

ITO, A.; CUI, B.; CHAVEZ, D.; CHAI, H.; SHIN, Y.G.; KAWANISKI, K.; KARDANUS, L.B.S.; RESWAN, S.; FARNSWORTH, N.R.; CORDELL, G.A.; PEZZUTO, J.M.; KINGHORN, A.D. 2001. Cytotoxic polyacetylenes from the twigs of *Ochanostachys amentacea*. **Journal of Natural Products**, **64**, 246-248.

JADHAV, R.B.; ANARTHE, S.J.; SURANA, S.J.; GOKHELE, S.B. 2005. Host-hemiparasite transfer of the C-glucosyl xanthone mangiferin between *Mangifera indica* and *Dendrophthoe falcate*. **Journal of plant interactions**, **1**, 171-177.

KAPLAN, M.A.C. & GOTTLIEB, O.R. 1990. Busca racional de princípios ativos em plantas. **Interciência** **1**, 26-29.

KIM, Y.; KIM, Y.S.; CHOI, S.U.; RYU, S.Y. 2004 Isolation of flavonol rhamnosides from *Loranthus tanakae* and their cytotoxic effect on human tumor cell lines. **Archives of Pharmacal Research**, **27**, 44-74.

KOEHLER, F.E. 1887. Köhler's Atlas der Medizinal-Pflanzen. Disponível em: <http://pharm1.pharmazie.uni-greifswald.de/allgemei/koehler/koeh-eng.htm>
Acesso em 13-Junho-2007.

KONG, D.; DONG, Y. LUO, S.; LI, H.; LEI, X. 1988a. Chemical components of *Viscum coloratum*. III. Structure of viscumneosides III, V, and VI. **Yaoxue Xuebao**, **23**, 593-600.

KONG, D.; DONG, Y. LUO, S.; LI, H.; LEI, X. 1988b. Chemical components of *Viscum coloratum*: IV. Structure of viscumneoside IV. **Yaoxue Xuebao**, **23**, 707-10.

KONG, D.; DONG, Y. LUO, S.; LI, H.; LEI, X. 1988C. Determination of new flavone glycosides in colored mistletoe (*Viscum coloratum*) by HPLC. **Zhongcaoyao**, **19**, 495-6, 498.

KONG, D.; LI, H.; LUO, S.. 1990. Chemical componentes of *Viscum coloratum* VII. Isolation and structure of viscumneoside VII. **Yaoxue Xuebao**, **25**, 608-611.

KONISHI, T.; NISHIO, T.; KIYOSAWA, S. 1996. The constituents and analysis of *Taxillus kaempferi* and the host, *Pinus thunbergii*. **Natural medicines**, **50**, 28-33.

KOZUBEK, A. & TYMAN, J.H.P. 1999. Resorcinolic lipids, the natural nonisoprenoid phenolic amphiphiles and their biological activity. **Chemical Reviews**, **99**, 1-25.

KRUSE, C.; JOST, R.; HILLEBRAND, H.; HELL, H. 2005. Sulfur-rich proteins and their agrobiotechnological potential for resistance to plant pathogens. *In*. Luijt J. de Kok & Ewald Schnug (eds). Proceedings of the 1st Sino-German Workshop on Aspects of Sulfur Nutrition of plants. 23-27 May 2004, Shenyang, China. **Landbauforschung Völkenrod**, **283**, 73-79.

KUBO, I.; KIM, M.; NAOKI, H. 1987. New insect growth inhibitory flavan glycosides from *Viscum tuberculatum*. **Tetrahedron Letters**, **28**, 921-924.

LARSSON, S. 2007. Mistletoes and Thionins, as selection models in natural products drug discovery. Acta Universitatis Upsaliensis. **Digital Comprehensive Summaries of Uppsala Dissertations from the Faculty of Pharmacy**, **49**. 65pp.

LEAL, L.; BUJOKAS, W.M.; BIONDI, D. 2006. Análise da infestação de erva-de-passarinho na urbanização de ruas de Curitiba, PR. **Floresta**, **36**, 323-330.

LI, L.; LI, M.; FENG, W. 1994. Chemical constituents of libanjisheng (*Helixanthera parasitica*). **Zhongcaoyao**, **25**, 283-284.

LI, L.; LI, M.; YANG, Z.; HU, X. 1995. Chemical constituents of hairy-leaf taxillus (*Taxillus nigrans*). **Zhongcaoyao**, **26**, 118-121.

LI, L.; LI, M.; ZHU, A. 1996. Studies on the chemical constituents of *Taxillus levinei* (Merr) H.S. Kiu. **Zhongguo Zhongyao Zazhi**, **21**, 34-35.

LI, M.; LI, L.; LI, P. 1987 Studies on the flavonoids of *Taxillus nitchuenensis* (Lecomte) Danser and *T. nitchuenensis* var. *duclouseii* (Lecomte) Kiued. **Zhongyao Tongbao**, **11**, 738-740.

LIGHTELM, S.P. 1954. Hydroxy acid from the oil of *Ximenia caffra*. **Chemistry and Industry**, 249-56.

LIN, J.; CHIOU, Y.; LIN, Y. 2002. Phenolic Glycosides from *Viscum angulatum*. **Journal of Natural Products**, **65**, 638-640.

LIU, K.C.; LEE, S.S. 1993. Flavanoid glucosides isolated from *Viscum liquidambaricum*. **Zhonghua Yaoxue Zazhi**, **45**, 231-235.

LOESENER, T. 1942b. Hippocrateaceae. *In* A. Engler, H. Harms, and J. Matfeld [eds.], **Die Natürlichen Pflanzenfamilien**, **20b**, 198–231. Duncker & Humblot, Berlin, Germany

LOHEZIC-LE DEVEHAT, F.; TOMASI, S.; FONTANEL, D.; BOUSTIE, J. 2002. Flavonols from *Scurrula ferruginea* Danser (Loranthaceae). **Zeitschrift fuer Naturforschung, C: journal of Bioscience**, **57**, 1092-1095.

LORCH, E. 1993. New investigations on flavonoids from *Viscum album* L. ssp. abietis, album, and austriacum. **Zeitschrift fuer Naturforschung, C: Journal of Biosciences**, **48**, 105-7.

MALECÓT, V.; NICKRENT, D.L.; BAAS, P.; Van den OEVER, L.; LOBREAU-CALLEN, D. 2004. A morphological cladistic analysis of Olacaceae. **Systematic Botany**, **29**, 569-586.

MALLAVADHANI, U.V.; NARASIMBAN, K.; SUDHAKAR, A.V.S.; MAHAPATRA, A.; LI, W.; VAN BREMEN, R.B. 2006. Three new pentacyclic triterpenes and some flavonoids from the fruti of an Indian ayurvedic plant *Dendrophloe falcata* and their estrogen binding activity. **Chemical and Pharmaceutical Bulletin**, **54**, 740-744.

MILLER, R.W.; WEISLEDER, D.; KLEIMAN, R.; PLATINER, R.D.; SMITH, C.R.Jr 1977. Oxygenated fatty acids of isano oil. **Phytochemistry**, **16**, 947-951.

MORRIS, L.J. 1963. The oxygenated acids of isano oil. **Journal of the Chemical Society**, 5779-5787.

NICKRENT, D. L. 2002. Phylogenetic origins of parasitic plants. Chapter 3, pp. 29-56 *In* J. A. López-Sáez, P. Catalán and L. Sáez (eds.), **Parasitic Plants of the Iberian Peninsula and Balearic Islands**. Mundi-Prensa, Madrid.

NICKRENT, D.L. 2000. Mistletoe phylogenetics: current relationships gained from analysis of DNA sequences, pp. 48-57 *In* **Proceedings of the Western International Forest Disease Work Conference**, August 14-18, 2000. Waikoloa, Hawai'i. 253pp.

NICKRENT, D. L.; FRANCHINA, C.R. 1990. Phylogenetic relationships of the Santalales and relatives. **Journal of Molecular Evolution**, **31**, 294-301.

NICKRENT, D.L.; MUSSELMAN, L.J. 2004. Introduction to Parasitic Flowering Plants. **The Plant Health Instructor**. DOI: 10.1094/PHI-I-2004-0330-01

NORTON, D.A.; LANGE, P.J. 1999. Host specificity in parasitic mistletoes (Loranthaceae) in New Zealand. **Functional Ecology**, **13**, 552-559.

OCHOCKA, J.R.; PIOTROWSKI, A. 2002. Biologically active compounds from European mistletoe (*Viscum album* L.). **Canadian Journal of Plant Pathology**, **24**, 21-28.

OHASHI, K.; WINAMO, H.; MUKAI, M.; INOWE, M.; PRANA, M.S.; SIMNAJUNTAK, P.; SHIBRUYYA, H. 2003. Indonesian Medicinal Plants. XXV. Cancer cell invasion inhibitory effects of chemical constituents in the parasitic plant *Scurrula atropurpurea*. **Chemical and Pharmaceutical Bulletin**, **51**, 343-345.

OHTA, N.; TAGISHITA, K. 1970. Isolation and structures of new flavonoids, flavoyadorinin A, flavoyadorinin B and homoflavoyadorinin B in the leaves of *Viscum album* var. *coloratum* epiphyting to *Pyrus communis*. **Agricultural and Biological Chemistry**, **34**, 900-907

OKODA, K.; SAKURAI, A. 1983. Chemical studies on the mistletoe. VI. Flavonoids constituents of *Taxillus kaempferi* occurring on *Pinus densiflora*. **Reports of Faculty of Science, Shizuoka University**, **17**, 57-63.

ORHAN, D.D.; CALIS, I.; ERGUN, F. 2002. Two new flavonoid glycosides from *Viscum album* ssp. *Album*. **Pharmaceutical Biology (Lisse, Netherlands)**, **40**, 380-383.

QASEM, J.R. 2006. Host range of the parasitic weed *Osyris alba* L. in Jordan **Weed Biology and Management** **6**, 74-78.

PUGIALLI, H.R.L.; KAPLAN, M.A.C.; GOTTLIEB, O.R. 1994. Evolução flavonoídica em Zingiberales. **Anais da Academia Brasileira de Ciências**, **66**, 491-494.

ŘEZANKA, T.; SIGLER, K. 2007. Identification of very long chain unsaturated fatty acids from *Ximenia* oil by atmospheric pressure chemical ionization liquid chromatography-mass spectroscopy. **Phytochemistry**, **68**, 925-934.

ROSS, C.M. 2006. Viscin cells in the dwarf mistletoes *Arceuthobium americanum* - "green springs" with potential roles in explosive seed discharge and seed adhesion. **Davidsonia**, **17**, 75-86.

SADIK, G.; ISLAM, R.; RAHMAN, M.M.; KHONDKAR, P.; RASHID, M.A. 2003. Antimicrobial and cytotoxic constituents of *Loranthus globosus*. **Fitoterapia**, **74**, 308-311.

SAKURAI, A.; OKUMURA, Y. 1978. Taxillusin, a new flavonoid glycoside isolated from *Taxillus kaempferi*. **Chemistry Letters**, 259-262

SAMUELSSON, G.; PETTERSSON, B.; LJUNGGREN, A. 1977. Toxic proteins from the mistletoe *Dendrophthora clavata*. I. Isolation and properties of denclatoxin A and denclatoxin B. **Acta Pharmaceutica Suecica**, **14**, 237-244.

SEETHARAMAN, T.R.; MANJULA, K. 1996. Flavonoid pattern of semiparasite *Taxillus bracteatus* growing on *Lansea coromandelica* and *Psidium guajava*. **Journal of the Indian Chemical Society**, **73**, 499-500.

SHEN, C.; CHANG, Y.; HO, L. 1993. Nuclear magnetic resonance studies of 5,7-dihydroxyflavonoids. **Phytochemistry**, **34**, 843-845.

SHIBUYA, H.; OHASHI, K.; KITAGAWA, I. 1999. Search for pharmacochemical leads from tropical rainforest plants. **Pure and Applied Chemistry**, **71**, 1109-1113.

SILVA, A.L.; PIATO, A.L.; FERREIRA, J.G.; MARTINS, B.S.; NUNES, D.S.; ELISABETSKY, E. 2007. Promnesic effects of *Ptychopetalum olacoides* in aversive and non-aversive learning paradigms. **Journal of Ethnopharmacology**, **109**, 449-457.

SIMMONS, M.P.; CLEVINGER, C.C.; SAVOLAINEN, V.; ARCHER, R.H.; MATHEWS, S., DOYLE, J. 2001. Phylogeny of the Celastraceae inferred from phytochrome B gene sequence and morphology . **American Journal of Botany**, **88**, 313-325.

SIMON M.P., HEDIN J.P. 1999. Relationships and morphological character change among genera of Celastraceae *sensu lato* (including Hippocrateaceae). **Annals of the Missouri Botanical Garden**, **86**, 723-757.

SLEUMER, H.O. 1984b. **Olacaceae** In Flora Neotropica Monography 38. ed. Organization for flora Neotrópica. Bronx: New York Botanical Garden. 1-160.

SOEJIMA, A.; WEN, J. 2006. Phylogenetic analysis of the grape family (Vitaceae) based on three chloroplast markers. **American Journal of Botany**, **93**, 278-287.

SOARES, G.L.G.; KAPLAN, M.A.C. 2001. Analysis of flavone-flavonol ratio in Dicotyledoneae. **Botanical Journal of the Linnean Society**, **135**, 61-66.

SPITZER, V.; MARX, F.; MAIA, J.G.S.; PFEILSTICKER, K. 1990. *Curupira tefeensis* (Olacaceae)- a rich source of very long chain fatty acids. **Fett Wissenschaft Technologie**, **92**, 165-168.

SPITZER, V.; MARX, F.; MAIA, J.G.S.; PFEILSTICKER, K. 1991. *Curupira tefeensis*. Part 2. Occurrence of acetylenic fatty acids. **Fett Wissenschaft Technologie**, **93**, 169-174.

SPITZER, V.; TOMBERG, W.; HARTSMANN, R.; AICHHOLZ, R. 1997. Analysis of the seed oil of *Heisteria silvanii* (Olacaceae)- a rich source of a novel C-18 acetylenic fatty acid. **Lipids**, **32**, 1189-1200.

STAUFFER, H. U. 1969. Amphorogyneae eine Neue Tribus der Santalaceae, **Vierteljahrsschrift der Naturforschenden Gesellschaft in Zurich**, **114**, 49-76.

TAIDE, Y.B.; BABU, L.C.; ABRAHAM, C.C. 1995. Influence of host species in the initial growth and development of sandal (*Santalum album* Linn.). **Indian Journal of Forestry**, **17**, 288-292.

TAKHTAJAN, A.L. 1980. Outline of the Classification of Flowering Plants (Magnoliophyta). **The Botanical Review**, **46**, 225-359.

TAKHTAJAN, A. 1997. **Diversity and Classification of Flowering Plants**. Columbia University Press, New York, 620pp.

THOMÉ, O.W. 1885-1905. Flora von Deutschland Österreich und der Schweiz. *In Wort und Bild für Schule und Haus*. Disponível em http://www.gfmer.ch/TMCAM/Atlas_medicinal_plants Acesso em 28 - Maio - 2007.

THORNE, R.F. 1992. An updated phylogenetic classification of the flowering plants. **Aliso**, **13**, 365-389.

TILNEY, P.; LUBKE, R. 1974. A chemotaxonomy study of twelve species of the family Loranthaceae. *Journal of South African Botany*, **40**, 315-322.

VARELA, B. G.; FERNANDEZ, T.; RICCO, R. A.; ZOLEZZI, P. C.; HAJOS, S. E.; GURNI, A. A.; ALVAREZ, E.; WAGNER, M. L. 2004. *Phoradendron liga* (Gill. ex H. et A.) Eichl. (Viscaceae) used in folk medicine: anatomical, phytochemical, and immunochemical studies. **Journal of Ethnopharmacology**, **94**, 109-116.

WANG, Q.; LI, L.; LI, M. 1996. Studies on the chemical constituents of qiaohuajinsheng (*Macrosolen cochinchinensis*). **Zhongcaoyao**, **27**, 518-521.

WANG, Y.; ZHONG, S. Y.; MA, X.; TIAN, W. 2006. Potent inhibition of fatty acid synthase by parasitic loranthus (*Taxillus chinensis* DC.) and its constituent avicularin. **Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry**, **21**, 87-93.

WATSON, D.M. 2001. Mistletoe- A keystone resource in forests and woodlands worldwide. **Annual Review of Ecology and Systematics**, **32**, 219-249.

WERTH, C.R.; BAIRD, W.V.; MUSSELMAN, L.J. 1979. Root parasitism in *Schoepfia schreberi* Olacaceae. **Biotrópica**, **11**, 140-143.

WILSON, C.A.; CALVIN, C.L. 2006. An origin of aerial branch parasitism in the mistletoe family, Loranthaceae. **American Journal of Botany**, **93**, 787-796.

WINK, M. 2003. Evolution of secondary metabolites from an ecological and molecular phylogenetic perspective. **Phytochemistry**, **64**, 3-19.

ZHOU, Y.H.; LI, W.; YI, F.; LIU, X. 2001. Determination of fatty acids in *Malaria oleifera* oil by CG/MS. **Sepu**, **19**, 147-48.

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)