**UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA**
**CENTRO DE CIÊNCIAS DA SAÚDE**
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM PRODUTOS NATURAIS E SINTÉTICOS BIOATIVOS**

# ESTUDO FITOQUÍMICO E AVALIAÇÃO BIOLÓGICA DOS EXTRATOS, FASES E COMPOSTOS ISOLADOS DE TRÊS ESPÉCIES DO GÊNERO *PAVONIA* (MALVACEAE) FRENTE AO *Aedes aegypti* (L.)

**JANDERSON BARBOSA LEITE DE ALBUQUERQUE**

**JOÃO PESSOA-PB**
**2026**

**JANDERSON BARBOSA LEITE DE ALBUQUERQUE**

# ESTUDO FITOQUÍMICO E AVALIAÇÃO BIOLÓGICA DOS EXTRATOS, FASES E COMPOSTOS ISOLADOS DE TRÊS ESPÉCIES DO GÊNERO *PAVONIA* (MALVACEAE) FRENTE AO *Aedes aegypti* (L.)

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos do Centro de Ciências da Saúde da Universidade Federal da Paraíba em cumprimento às exigências para obtenção do título de Doutor em Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos.

Área de concentração: **Farmacoquímica**.

**ORIENTADORA:** Profa. Dra. Maria de Fátima Vanderlei de Souza

**JOÃO PESSOA-PB**

**2026**

**Catalogação na publicação**
**Seção de Catalogação e Classificação**

A345e Albuquerque, Janderson Barbosa Leite de.
Estudo fitoquímico e avaliação biológica dos extratos, fases e compostos isolados de três espécies do gênero Pavonia (Malvaceae) frente ao Aedes aegypti (L.) / Janderson Barbosa Leite de Albuquerque. - João Pessoa, 2026.
325 f. : il.

Orientação: Maria de Fátima Vanderlei de Souza.
Tese (Doutorado) - UFPB/CCS.

1. Estudo fitoquímico. 2. Malvaceae. 3. Pavonia. 4. Atividade biológica. 5. Aedes aegypti L. I. Souza, Maria de Fátima Vanderlei de. II. Título.

UFPB/BC CDU 547.9(043)

**JANDERSON BARBOSA LEITE DE ALBUQUERQUE**

# ESTUDO FITOQUÍMICO E AVALIAÇÃO BIOLÓGICA DOS EXTRATOS, FASES E COMPOSTOS ISOLADOS DE TRÊS ESPÉCIES DO GÊNERO *PAVONIA* (MALVACEAE) FRENTE AO *Aedes aegypti* (L.)

**Aprovado em: 19/02/2026**

## BANCA EXAMINADORA

Documento assinado digitalmente
gov.br
MARIA DE FATIMA VANDERLEI DE SOUZA
Data: 26/03/2026 13:20:30-0300
Verifique em https://validar.iti.gov.br

---

**Profª. Drª. Maria de Fátima Vanderlei de Souza**
(Orientadora)

Documento assinado digitalmente
gov.br
JOSEAN FECHINE TAVARES
Data: 25/03/2026 08:14:49-0300
Verifique em https://validar.iti.gov.br

---

**Prof. Dr. Josean Fechine Tavares**
(Examinador Interno)

Documento assinado digitalmente
gov.br
TATJANA KEESEN DE SOUZA LIMA CLEMENTE
Data: 20/03/2026 15:16:24-0300
Verifique em https://validar.iti.gov.br

---

**Profa. Dra. Tatjana Keesen de Souza Lima Clemente**
(Examinadora Interna)

Documento assinado digitalmente
gov.br
HEMERSON IURY FERREIRA MAGALHAES
Data: 23/03/2026 21:18:17-0300
Verifique em https://validar.iti.gov.br

---

**Prof. Dr. Hemerson Yuri Ferreira Magalhães**
(Examinador Externo)

Documento assinado digitalmente
gov.br
JORGE MAURICIO DAVID
Data: 19/03/2026 19:29:16-0300
Verifique em https://validar.iti.gov.br

---

**Prof. Dr. Jorge Maurício David**
(Examinador Externo)

*“A **DEUS**, por ter me concedido o dom da vida, sabedoria, e coragem para enfrentar e vencer os obstáculos da vida.”*

*“À minha **MÃE**, Voleide Barbosa, por ser um exemplo de mulher guerreira e vencedora que sempre me apoiou e me deu forças para não desistir e seguir em frente.”*

***DEDICO***

## AGRADECIMENTOS


- A **Deus**, por ser essencial em minha vida, autor do meu destino, meu guia, e por nunca me abandonar, estando sempre ao meu lado em todos os momentos em que mais precisei de sua força e de suas bênçãos;
- À minha mãe, **Voleide Barbosa**, exemplo de mulher incomparável de dedicação, força, garra e fé. Seu cuidado e paciência me deu a esperança para seguir em frente e a certeza de que não estou sozinho nessa caminhada;
- Ao meu irmão, **João Baptista Segundo**, pela paciência, companheirismo e bom-humor que me motivaram a chegar até aqui;
- Aos meus avós maternos, **Inácio Barbosa** (*In Memoriam*) e **Maria José** (*In Memoriam*), à minha avó paterna, **Maria das Dores** (*In Memoriam*), pelos ensinamentos e lições durante a infância, ensinamentos estes que carrego até hoje;
- Aos meus tios, **Valdira** e **João Mendes** (*In Memoriam*) por terem me recebido de braços abertos em sua residência num momento de necessidade, me ajudando significativamente a alcançar este objetivo;
- À minha tia, **Valderez** por todo o seu carinho e apoio constante;
- Aos primos e primas, **Alexsandra**, **Clydemberg**, **Célio**, **Ana Clara**, **Joseppe**, **Henrique e Diana** por sempre acreditarem no meu potencial e pelos conselhos amigos;
- À minha professora e orientadora **Drª Maria de Fátima Vanderlei de Souza** por todos os seus ensinamentos, carinho e atenção em sala de aula, em laboratório e fora dele. Agradeço por toda a sua orientação desde à Iniciação Científica e por toda contribuição recebida em benefício do meu crescimento pessoal e profissional;
- A todos que fazem ou fizeram parte da Equipe Vanderlei: **Maria Denise, Diégina, Ana Laura, Camila Macaúbas, Wallace, Isabelly, Madeleine e Raquel** por todos os momentos de descontração, estudos em equipe e crescimento em âmbito laboratorial;
- Aos colegas e amigos da pós-graduação **Nikole, Karol, Anauara, Thalisson, Yuri, Jociano, Thiago, Eloiza e Nathália** que de alguma forma me ajudaram a crescer como pesquisador e pelas boas companhias em todas as tardes;
- À **Universidade Federal da Paraíba** por possibilitar a execução deste trabalho científico.

- Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (**CNPq**) pela bolsa concedida;
- A todos os funcionários do Instituto de Pesquisa em Fármacos e Medicamentos pelos diversos serviços prestados, especialmente a **Rose**, **Raimundo Nonato, Marcelo, Carlos, Anderson, Mônica e Evandro**;
- A **Renan Leite e toda equipe da professora Dra. Fabíola da Cruz Nunes** pelo apoio e realização dos ensaios de atividade biológica realizados nesta pesquisa;
- À banca examinadora pela disponibilidade, sugestões e contribuição para o aprimoramento deste trabalho;
- Aos professores da graduação pelos conhecimentos adquiridos e trocas de experiências, cujos ensinamentos me acompanharão por toda a vida;
- Às minhas amigas de infância, **Áurea Kelly** e **Larissa** pela amizade e por todo o incentivo na minha trajetória;
- Às minhas amigas **Michelle, Maria Helena e Edith** por toda amizade durante todos esses anos desde o Ensino Médio;
- Aos professores **Francisco Jaime** e **Rodrigo Aquino** pelas oportunidades e ensinamentos durante a graduação em Ciências Biológicas que me permitiram enxergar o caminho de ser um pesquisador;
- À minha grande amiga bióloga **Bruna Carolline** por sempre me apoiar e incentivar a fazer o que amava;
- À minha grande parceira e amiga da graduação em Farmácia, **Hianka**, por todos os momentos de dificuldades e alegrias compartilhados;
- Agradeço a **Júnior** pelo companheirismo, apoio, incentivo e paciência durante toda a realização deste trabalho.
- E a todos aqueles que contribuíram de forma direta e indireta para o alcance deste objetivo.

A todos, muito obrigado!

*“O Senhor é refúgio para os oprimidos, uma torre segura na hora da adversidade. Os que conhecem o teu nome confiam em ti, pois tu, Senhor, jamais abandonas os que te buscam.”*

***SALMOS 9:9-10***

## RESUMO

ALBUQUERQUE, Janderson Barbosa Leite de. **Estudo Fitoquímico e avaliação biológica dos extratos, fases e compostos isolados de três espécies do gênero *Pavonia* (Malvaceae) frente ao *Aedes aegypti* (L.).** 326 p. Tese (Doutorado em Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos) - Centro de Ciências da Saúde, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, 2026.

As plantas medicinais representam alternativas às terapias alopáticas e a família Malvaceae destaca-se pela presença de compostos bioativos com propriedades anticâncer, anti-inflamatórias, antimicrobianas e antivirais. As espécies *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana* são conhecidas popularmente como malva-rosa, malva-rasteira e algodão-bravo, respectivamente, distribuídas por grande parte do território brasileiro. A pesquisa teve como objetivo isolar e caracterizar estruturalmente os constituintes químicos das três espécies e avaliar o potencial larvicida de seus extratos, fases e substâncias isoladas frente às larvas L4 do mosquito *Aedes aegypti*. Inicialmente as partes aéreas das espécies, isoladamente, foram desidratadas, trituradas e submetidas à maceração com EtOH a 95%. Seus extratos etanólicos bruto (EEB) foram submetidos, separadamente, à cromatografia líquido-líquido com hexano, clorofórmio, acetato de etila e n-butanol, obtendo suas respectivas fases, além das fases hidroalcoólicas. Um *screening* biológico desses extratos e fases frente ao estágio larval L4 do mosquito *A. aegypti* foi realizado, utilizando diferentes concentrações das amostras-teste, e a mortalidade avaliada ao longo de 24 horas. O estudo fitoquímico das três espécies utilizou técnicas cromatográficas clássicas, HPLC, CG/EM, HPLC/EM, além dos métodos espectroscópicos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ uni e bidimensionais, resultando no isolamento e na identificação de dezoito compostos descritos em artigo publicado (Anexo 2), acrescidos de quatro substâncias derivadas do ácido cafeoilquínico em *P. malacophylla*; esteroides, triterpenos, feofitinas, flavonoides metoxilados e glicosilados, hidrocarbonetos, ácido graxo, ácido fenólico e fenilpropanoides em *P. cancellata*; além de cinco flavonoides glicosilados em *P. blanchetiana*, complementado com mais doze compostos que foram anotados por espectrometria de massas. A atividade larvicida dos extratos das três espécies vegetais foram avaliadas frente às larvas L4 de *A. aegypti*. Os EEB de *P. malacophylla* e *P. cancellata* destacaram-se nessa atividade, apresentando valores de $CL_{50}$ de 3,0 mg/mL e 2,8 mg/mL, respectivamente. A análise das fases hexânica, clorofórmica, acetato de etila, n-butanólica e hidroalcoólica evidenciou que a fase hexânica apresentou os melhores resultados larvicidas, com valores de $CL_{50}$ de 0,46 mg/mL para *P. malacophylla* e de 0,79 mg/mL para *P. cancellata*. A fase hexânica do EEB de *P. blanchetiana*, apresentou a maior atividade larvicida entre todas as amostras avaliadas, com $CL_{50}$ de 0,043 mg/mL. Em comparação com os EEB, as fases clorofórmicas das três espécies apresentaram valores de $CL_{50}$ semelhantes entre si, seguidas de atividades moderadas nas fases acetato de etila, hidroalcoólica e n-butanólica. De modo geral, entre todas as amostras avaliadas, *P. malacophylla* destacou-se de forma mais expressiva quanto à atividade larvicida, indicando maior potencial biológico frente às larvas de *A. aegypti*. A análise da atividade dos flavonoides frente às larvas L4 de *A. aegypti* mostrou que o canferol apresentou maior atividade larvicida a 1,0 mg/mL, atribuída à ausência de glicosilação e à maior lipofilicidade, o que facilita a permeação através da cutícula larval e das membranas celulares. Dessa maneira, esses resultados contribuíram para o conhecimento químico e biológico da família Malvaceae, além de evidenciar o potencial larvicida das espécies do gênero *Pavonia* frente ao *Aedes aegypti*, fornecendo dados que indicam a possibilidade de desenvolver um produto natural mais eficaz no controle do vetor.

**Palavras-chave:** Estudo Fitoquímico; Malvaceae; *Pavonia*; Atividade biológica; *Aedes aegypti* L.

## ABSTRACT

Medicinal plants represent alternatives to allopathic therapies, and the Malvaceae family stands out for the presence of bioactive compounds with anticancer, anti-inflammatory, antimicrobial, and antiviral properties. The species *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata*, and *Pavonia blanchetiana* are popularly known as 'malva-rosa', 'malva-rasteira' and 'algodão-bravo', respectively, and are distributed throughout much of Brazil. This research aimed to isolate and structurally characterize the chemical constituents of the three species and evaluate the larvicidal potential of their extracts, phases, and isolated substances against L4 larvae of the *Aedes aegypti* mosquito. Initially, the aerial parts of the species were dehydrated, crushed, and macerated with 95% EtOH. Their crude ethanolic extracts (CEE) were separately subjected to liquid-liquid chromatography with hexane, chloroform, ethyl acetate, and n-butanol, obtaining their respective phases, in addition to the hydroalcoholic phases. A biological screening of these extracts and phases against the L4 larval stage of the *A. aegypti* mosquito was performed, using different concentrations of the test samples, and mortality was evaluated over 24 hours. The phytochemical study of the three species used classical chromatographic techniques, HPLC, GC/MS, HPLC/MS, in addition to one- and two-dimensional $^{1}H$ and $^{13}C$ NMR spectroscopic methods, resulting in the isolation and identification of eighteen compounds described in a published article (Appendix 2), plus four substances derived from caffeoylquinic acid in *P. malacophylla*; steroids, triterpenes, pheophytins, methoxylated and glycosylated flavonoids, hydrocarbons, fatty acids, phenolic acids, and phenylpropanoids were found in *P. cancellata*; in addition to five glycosylated flavonoids in *P. blanchetiana*, supplemented by twelve more compounds that were recorded by mass spectrometry. The larvicidal activity of the extracts from the three plant species was evaluated against L4 larvae of A. aegypti. The extracts from *P. malacophylla* and *P. cancellata* stood out in this activity, presenting $LC_{50}$ values of 3.0 mg/mL and 2.8 mg/mL, respectively. Analysis of the hexane, chloroform, ethyl acetate, n-butanolic, and hydroalcoholic phases showed that the hexane phase presented the best larvicidal results, with $LC_{50}$ values of 0.46 mg/mL for *P. malacophylla* and 0.79 mg/mL for *P. cancellata*. The hexane phase of the *P. blanchetiana* EEB showed the highest larvicidal activity among all samples evaluated, with an $LC_{50}$ of 0.043 mg/mL. Compared to the CEE, the chloroform phases of the three species showed similar $LC_{50}$ values, followed by moderate activity in the ethyl acetate, hydroalcoholic, and n-butanolic phases. Overall, among all samples evaluated, *P. malacophylla* stood out most significantly in terms of larvicidal activity, indicating greater biological potential against *A. aegypti* larvae. Analysis of flavonoid activity against L4 *A. aegypti* larvae showed that kaempferol exhibited the highest larvicidal activity at 1.0 mg/mL, attributed to the absence of glycosylation and greater lipophilicity, which facilitates permeation through the larval cuticle and cell membranes. Thus, these results contributed to the chemical and biological knowledge of the Malvaceae family, in addition to highlighting the larvicidal potential of species of the genus *Pavonia* against *Aedes aegypti*, providing data that indicate the possibility of developing a more effective natural product for vector control.

**Keywords**: Phytochemical study; Malvaceae; *Pavonia*; Biological activity; *Aedes aegypti* L.

**SUMÁRIO**

**1. INTRODUÇÃO**.....31
**2. OBJETIVOS**.....34
2.1 Objetivo Geral.....35
2.2 Objetivos Específicos.....35
**3. REFERENCIAL TEÓRICO**.....36
3.1 Considerações sobre a família Malvaceae *sensu lato*.....37
3.2 Considerações sobre o gênero *Pavonia* Cav.....42
3.3 Considerações sobre a espécie *Pavonia malacophylla* (Link & Otto) Garcke.....44
3.4 Considerações sobre a espécie *Pavonia cancellata* (L.).....46
3.5 Considerações sobre a espécie *Pavonia blanchetiana* Miq.....48
3.6 Aspectos gerais sobre *Aedes aegypti* L.....49
3.6.1 Ciclo de vida e arboviroses transmitidas pelo *Aedes aegypti* L.....49
3.6.2 Principais formas de combate do vetor.....58
**4. METODOLOGIA**.....61
4.1 Procedimentos Gerais.....62
4.1.1 Levantamento bibliográfico.....62
4.1.2 Coleta dos Materiais Botânicos.....62
4.2 Estudo Fitoquímico.....64
4.2.1 Processamento das Plantas.....64
4.2.2 Obtenção dos Extratos e seus Particionamentos.....64
4.2.3 Procedimentos cromatográficos.....67
4.2.4 Caracterização estrutural das substâncias isoladas.....67
4.2.5 Processamento cromatográfico da fase $CHCl_3$ do Extrato Etanólico Bruto das partes aéreas de *Pavonia malacophylla*.....67
4.2.6 Processamento cromatográfico do precipitado A (30,0 g) do EEB das partes aéreas de *Pavonia cancellata*.....70
4.2.7 Processamento cromatográfico da fase AcOEt do EEB de *Pavonia cancellata*.....76
4.2.8 Processamento cromatográfico da fase $CHCl_3$ de *Pavonia cancellata*.....78
4.2.9 Processamento cromatográfico da fase AcOEt de *Pavonia*

*blanchetiana*.....81
4.3 Análise em Cromatografia Gasosa-Espectrômetro de Massas (CG-EM) da fração 01/03 da fração A-F do precipitado A do EEB das partes aéreas de *Pavonia cancellata*.....82
4.4 Análise de *LC-ESI-Q-TOF-MS* da fase n-ButOH e fase hidroalcóolica do EEB das partes aéreas de *Pavonia blanchetiana*.....83
4.5 Avaliação da atividade larvicida frente às larvas L4 do *Aedes aegypti* L.....83
4.5.1 Monitoramento do ciclo de vida do *Aedes aegypti* L.....83
4.5.2 Atividade larvicida.....84
4.5.3 Análise estatística.....85
**5. RESULTADOS E DISCUSSÃO**.....86
5.1 Substâncias isoladas das partes aéreas de *Pavonia malacophylla*.....87
5.2 Caracterização estrutural das substâncias isoladas de *Pavonia malacophylla*.....88
5.2.1 Determinação estrutural de *Pm*-1.....88
5.2.2 Determinação estrutural de *Pm*-2.....94
5.2.3 Determinação estrutural de *Pm*-3.....100
5.2.4 Determinação estrutural de *Pm*-4.....105
5.3 Substâncias isoladas das partes aéreas de *Pavonia cancellata*.....111
5.4 Caracterização estrutural das substâncias isoladas de *Pavonia cancellata*...114
5.4.1 Determinação estrutural de *Pc*-1.....114
5.4.2 Determinação estrutural de *Pc*-2.....118
5.4.3 Determinação estrutural de *Pc*-3.....125
5.4.4 Determinação estrutural de *Pc*-4.....131
5.4.5 Determinação estrutural de *Pc*-5.....138
5.4.6 Determinação estrutural de *Pc*-6..... 143
5.4.7 Determinação estrutural de *Pc*-7.....147
5.4.8 Determinação estrutural de *Pc*-8..... 155
5.4.9 Determinação estrutural de *Pc*-9.....159
5.4.10 Determinação estrutural de *Pc*-10.....163
5.4.11 Determinação estrutural de *Pc*-11.....172
5.4.12 Determinação estrutural de *Pc*-12.....176
5.4.13 Determinação estrutural de *Pc*-13.....180
5.4.14 Determinação estrutural de *Pc*-14.....185

5.4.15 Determinação estrutural de *Pc*-15.....195
5.4.16 Determinação estrutural de *Pc*-16.....203
5.4.17 Determinação estrutural de *Pc*-17.....208
5.5 Substâncias isoladas das partes aéreas de *Pavonia blanchetiana*.....215
5.5.1 Determinação estrutural de *Pb*-1 e *Pb*-2.....216
5.5.2 Determinação estrutural de *Pb*-3.....226
5.5.3 Determinação estrutural de *Pb*-4.....231
5.6 Substâncias anotadas por *CLAE-EM/EM* da fase n-butanólica do EEB das partes aéreas de *Pavonia blanchetiana*.....243
5.7 Substâncias anotadas por *CLAE-EM/EM* da fase hidroalcoólica do EEB das partes aéreas de *Pavonia blanchetiana*.....255
5.8 Avaliação da atividade larvicida dos extratos e fases de *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana* frente a larvas L4 de *Aedes aegypti* L.....263
5.9 Avaliação da atividade larvicida das substâncias isoladas de *Pavonia cancellata* frente às larvas L4 de *Aedes aegypti* L.....271
**6. CONCLUSÕES**.....275
**7. REFERÊNCIAS**.....277
**ANEXO 1**.....300
**ANEXO 2**.....318

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

| | |
|---|---|
| **$^2J$** | Correlação à 2 ligações |
| **$^3J$** | Correlação à 3 ligações |
| **AcOEt** | Acetato de etila |
| **APT** | *Attached Proton Test* |
| **Cav.** | Cavanilles |
| **CC** | Cromatografia em Coluna |
| **CCDA** | Cromatografia em Camada Delgada Analítica |
| **CCDP** | Cromatografia em Camada Delgada Preparativa |
| **$CD_3OD$** | Metanol deuterado |
| **$CDCl_3$** | Clorofórmio Deuterado |
| **$CH_2Cl_2$** | Diclorometano |
| **$CHCl_3$** | Clorofórmio |
| **CLAE** | Cromatografia Líquida de Alta Eficiência |
| **d** | Dupleto |
| **DAD** | Detector de arranjo de diodos |
| **dd** | Duplo dupleto |
| **DMSO-$d_6$** | Dimetilsulfóxido deuterado |
| **EEB** | Extrato Etanólico Bruto |
| **EM** | Espectrometria de massa |
| **EMAR-IES** | Espectrometria de massa de alta resolução com ionização por electrospray |
| **EtOH** | Etanol |
| **g** | Grama |
| **Hex** | Hexano |
| **HMBC** | *Heteronuclear Multiple Bond Correlation* |
| **HPLC** | *High performance liquid chromatography* |
| **HSQC** | *Heteronuclear Single Quantum Correlation* |
| **Hz** | Hertz |
| ***J*** | Constante de acoplamento |
| **kg** | Quilograma |
| **LMCA** | Laboratório Multiusuário de Caracterização e Análise |
| **m** | Multipleto |
| **MeOH** | Metanol |

| | |
|---|---|
| **mg** | Miligrama |
| **MHz** | Megahertz |
| **mL** | Mililitro |
| ***Mo*** | Modelo |
| **n-ButOH** | N-butanol |
| **NP** | Difenilboriloxietilamina |
| **ppm** | Partes por milhão |
| **q** | Quarteto |
| **Rf** | Fator de Retenção |
| **RMN** | Ressonância Magnética Nuclear |
| **RMN $^{13}$C** | Ressonância Magnética Nuclear de Carbono treze |
| **RMN $^{1}$H** | Ressonância Magnética Nuclear de Hidrogênio |
| **s** | Simpleto |
| **SisGen** | Sistema Nacional de Gestão do Patrimônio Genético |
| **t** | Tripleto |
| **UV** | Ultravioleta |
| **δ** | Deslocamento químico |

## LISTA DE ESQUEMAS

**Esquema 1.** Classificação filogenética da família Malvaceae *sensu lato*.....37
**Esquema 2.** Obtenção do EEB das partes aéreas de *Pavonia malacophylla*.....64
**Esquema 3.** Obtenção do EEB das partes aéreas de *Pavonia cancellata*.....65
**Esquema 4.** Obtenção do EEB das partes aéreas de *Pavonia blanchetiana*.....65
**Esquema 5.** Cromatografia líquido-líquido do EEB de *Pavonia malacophylla*.....66
**Esquema 6.** Cromatografia líquido-líquido do EEB de *Pavonia blanchetiana*.....66
**Esquema 7.** Cromatografia líquido-líquido do EEB de *Pavonia cancellata*.....66
**Esquema 8.** Processamento cromatográfico da fase clorofórmica do EEB das partes aéreas de *Pavonia malacophylla*.....69
**Esquema 9.** Processamento cromatográfico do precipitado A do EEB das partes aéreas de *Pavonia cancellata*.....71
**Esquema 10.** Processamento cromatográfico da fração A-F do precipitado A do EEB das partes aéreas de *Pavonia cancellata*.....73
**Esquema 11.** Processamento cromatográfico da fase AcOEt do EEB das partes aéreas de *Pavonia cancellata*.....77
**Esquema 12.** Processamento cromatográfico da fase $CHCl_3$ do EEB das partes aéreas de *Pavonia cancellata*.....79
**Esquema 13.** Processamento cromatográfico da fase AcOEt do EEB das partes aéreas de *Pavonia blanchetiana*.....81

## LISTA DE FIGURAS

**Figura 1.** Distribuição geográfica da Família Malvaceae *sensu lato.* .....38
**Figura 2.** Gêneros pertencentes à Família Malvaceae *sensu* lato.....38
**Figura 3.** Distribuição geográfica do gênero *Pavonia* Cav.....43
**Figura 4.** Espécies pertencentes ao gênero *Pavonia*.....43
**Figura 5.** Distribuição geográfica da espécie *Pavonia malacophylla*.....45
**Figura 6.** Caracterização botânica da espécie *Pavonia malacophylla*.....45
**Figura 7.** Distribuição geográfica da espécie *Pavonia cancellata*.....46
**Figura 8.** Caracterização botânica da espécie *Pavonia cancellata*.....47
**Figura 9.** Distribuição geográfica da espécie *Pavonia blanchetiana*.....48
**Figura 10.** Caracterização botânica da espécie *Pavonia blanchetiana*.....49
**Figura 11.** Ciclo de vida do mosquito *Aedes aegypti* L.....50
**Figura 12.** Incidências de casos de Dengue no Brasil, 2025.....51
**Figura 13.** Distribuição dos sorotipos de *Dengue vírus* no Brasil – 2024.....51
**Figura 14.** Representação da estrutura e organização do genoma do vírus da dengue.....53
**Figura 15.** Incidências de casos de Chikungunya no Brasil, 2025.....54
**Figura 16.** Incidências de casos de Zika no Brasil, 2025.....56
**Figura 17.** Incidência de casos de febre amarela em áreas tropicais do planeta.....57
**Figura 18.** Incidências de casos de Febre amarela no Brasil, 2025.....57
**Figura 19.** Controle do vetor (Mecânico (A), Químico (B,C) e Biológico (D,E,F).....59
**Figura 20.** Localização da coleta do material botânico de *Pavonia malacophylla*.....62
**Figura 21.** Localização da coleta do material botânico de *Pavonia cancellata*.....63
**Figura 22.** Localização da coleta do material botânico de *Pavonia blanchetiana*.....63
**Figura 23.** Etapas do preparo das amostras biológicas para posterior exposição por 24h.....85
**Figura 24.** Cromatograma da fração 21/37 da fase clorofórmica do EEB das partes aéreas de *Pavonia malacophylla*.....87
**Figura 25.** Ácido 3-*O*-cafeoilquínico metil-éster.....91
**Figura 26.** Espectro de RMN $^{1}$H de *Pm*-1 (δ, DMSO-$d_6$, 400 MHz).....92
**Figura 27.** Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pm*-1 (δ, DMSO-$d_6$, 100 MHz).....93
**Figura 28.** Espectro de RMN $^{1}$H/$^{13}$C-HSQC de *Pm*-1 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).....93
**Figura 29.** Espectro de RMN $^{1}$H/$^{13}$C-HMBC de *Pm*-1 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100

MHz).....94
**Figura 30.** Ácido 3-*O*-cafeoilquínico etil-éster.....96
**Figura 31.** Espectro de RMN $^{1}$H de *Pm*-2 (δ, DMSO-$d_6$, 400 MHz).....98
**Figura 32.** Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pm*-2 (δ, DMSO-$d_6$, 100 MHz).....98
**Figura 33.** Espectro de RMN $^{1}$H/$^{13}$C-HSQC de *Pm*-2 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).....99
**Figura 34.** Espectro de RMN $^{1}$H/$^{13}$C-HMBC de *Pm*-2 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).....99
**Figura 35.** Ácido 5-*O*-cafeoilquínico etil-éster.....101
**Figura 36.** Espectro de RMN $^{1}$H de *Pm*-3 (δ, DMSO-$d_6$, 400 MHz).....103
**Figura 37.** Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pm*-3 (δ, DMSO-$d_6$, 100 MHz).....103
**Figura 38.** Espectro de RMN $^{1}$H/$^{13}$C-HSQC de *Pm*-3 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).....104
**Figura 39.** Espectro de RMN $^{1}$H/$^{13}$C-HMBC de *Pm*-3 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).....104
**Figura 40.** Ácido 4-*O*-cafeoilquínico etil-éster.....107
**Figura 41.** Espectro de RMN $^{1}$H de *Pm*-4 (δ, DMSO-$d_6$, 400 MHz). ).....108
**Figura 42.** Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pm*-4 (δ, DMSO-$d_6$, 100 MHz).....109
**Figura 43.** Espectro de RMN $^{1}$H/$^{13}$C-HSQC de *Pm*-4 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).....109
**Figura 44.** Espectro de RMN $^{1}$H/$^{13}$C-HMBC de *Pm*-4 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).....110
**Figura 45.** Estigmasterol glicosilado.....115
**Figura 46.** *β*-sitosterol glicosilado.....115
**Figura 47.** Espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-1 (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).....116
**Figura 48.** Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-1 (δ, $CDCl_3$, 100 MHz).....117
**Figura 49.** Expansão do espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-1 (δ, $CDCl_3$, 100 MHz).....117
**Figura 50.** Cicloeucalenol.....120
**Figura 51.** Estigmasterol.....120
**Figura 52.** *β*-sitosterol.....120
**Figura 53.** Espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-2 (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).....122
**Figura 54.** Expansão do espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-2 na região entre 0,1 e 0,5 ppm (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).....123

**Figura 55.** Expansão do espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-2 na região entre 4,6 e 4,7 ppm (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).....123
**Figura 56.** Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-2 (δ, $CDCl_3$, 100 MHz).....124
**Figura 57.** Expansão do espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-2 na região entre 106,0 e 157,0 ppm (δ, $CDCl_3$, 100 MHz).....124
**Figura 58.** Feofitina *a*.....126
**Figura 59.** Radical fitil.....128
**Figura 60.** Espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-3 (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).....128
**Figura 61.** Expansão do espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-3 na região entre 7,9 e 9,5 ppm (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).....129
**Figura 62.** Expansão do espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-3 na região entre 3,2 e 3,9 ppm (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).....129
**Figura 63.** Expansão do espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-3 na região entre 6,1 e 6,3 ppm (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).....130
**Figura 64.** Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-3 (δ, $CDCl_3$, 100 MHz).....130
**Figura 65.** 13$^{2}$-hidroxi-(13$^{2}$-*R*)-feofitina *a*.....132
**Figura 66.** 13$^{2}$-hidroxi-(13$^{2}$-*S*)-feofitina *a*.....132
**Figura 67.** Radical fitil.....135
**Figura 68.** Espectro de RMN $^{1}$H *Pc*-4 (δ, $CDCl_3$, 500 MHz).....136
**Figura 69.** Expansão do espectro de RMN $^{1}$H *Pc*-4 na região entre 7,9 e 9,6 ppm (δ, $CDCl_3$, 500 MHz).....136
**Figura 70.** Expansão do espectro de RMN $^{1}$H *Pc*-4 na região entre 3,2 e 3,7 ppm (δ, $CDCl_3$, 500 MHz).....137
**Figura 71.** Expansão do espectro de RMN $^{1}$H *Pc*-4 na região entre 6,1 e 6,3 ppm (δ, $CDCl_3$, 500 MHz).....137
**Figura 72.** Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-4 (δ, $CDCl_3$, 125 MHz).....138
**Figura 73.** 5,7-dihidroxi-3,7,8,4'-tetrametoxiflavona.....139
**Figura 74.** Espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-5 (δ, $CDCl_3$, 500 MHz).....141
**Figura 75.** Expansão do espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-5 na região entre 6,4 e 8,2 ppm (δ, $CDCl_3$, 500 MHz).....141
**Figura 76.** Expansão do espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-5 na região entre 3,8 e 3,9 ppm (δ, $CDCl_3$, 500 MHz).....142
**Figura 77.** Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-5 ( (δ, $CDCl_3$, 125 MHz).....142
**Figura 78.** 5,7-dihidroxi-3,8,4´-trimetoxiflavona.....144

**Figura 79.** Espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-6 (δ, $CDCl_3$, 500 MHz).....145
**Figura 80.** Expansão do espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-6 na região entre 6,4 e 8,1 ppm (δ, $CDCl_3$, 500 MHz).....146
**Figura 81.** Expansão do espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-6 na região entre 3,8 e 3,9 ppm (δ, $CDCl_3$, 500 MHz).....146
**Figura 82.** Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-6 (δ, $CDCl_3$, 125 MHz).....147
**Figura 83.** 3,7,8-trimetoxi-herbacetina.....149
**Figura 84**. Espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-7 (δ, DMSO-$d_6$, 400 MHz).....152
**Figura 85**. Expansão do espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-7 (δ, DMSO-$d_6$, 400 MHz).....152
**Figura 86**. Expansão do espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-7 (δ, DMSO-$d_6$, 400 MHz).....153
**Figura 87**. Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-7 (δ, DMSO-$d_6$, 100 MHz).....153
**Figura 88**. Espectro de RMN $^{1}$H/$^{13}$C-HSQC de *Pc*-7 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).....154
**Figura 89**. Espectro de RMN $^{1}$H/$^{13}$C-HMBC de *Pc*-7 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).....154
**Figura 90**. Espectro de RMN $^{1}$H/$^{13}$C-HMBC de *Pc*-7 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).....155
**Figura 91.** Hexacosano.....156
**Figura 92.** Tetracontano.....156
**Figura 93**. Cromatograma da mistura de hidrocarbonetos.....156
**Figura 94.** Espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-8 (δ, $CDCl_3$, 500 MHz).....157
**Figura 95.** Expansão do espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-8 (δ, $CDCl_3$, 500 MHz).....157
**Figura 96.** Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-8 (δ, $CDCl_3$, 125 MHz).....158
**Figura 97.** Expansão do espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-8 (δ, $CDCl_3$, 125 MHz).....158
**Figura 98.** Ácido Palmítico.....160
**Figura 99.** Espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-9 (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).....161
**Figura 100.** Expansão do espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-9 (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).....161
**Figura 101.** Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-9 (δ, $CDCl_3$, 100 MHz).....162
**Figura 102.** Expansão do espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-9 (δ, $CDCl_3$, 100 MHz)....162
**Figura 103.** 24(*R*)-cicloart-25-en-3β,24-diol.....164
**Figura 104.** 24(*S*)-cicloart-25-en-3β,24-diol.....164
**Figura 105.** Espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-10 (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).....168
**Figura 106.** Expansão do espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-10 (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).....168

**Figura 107.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-10 (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).....169
**Figura 108.** Espectro de RMN $^{13}C$-APT de *Pc*-10 (δ, $CDCl_3$, 100 MHz).....169
**Figura 109.** Expansão do espectro de RMN $^{13}C$-APT de *Pc*-10 (δ, $CDCl_3$, 100 MHz).....170
**Figura 110.** Expansão do espectro de RMN $^{13}C$-APT de *Pc*-10 (δ, $CDCl_3$, 100 MHz).....170
**Figura 111.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HSQC de *Pc*-10 (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz).....171
**Figura 112.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HMBC de *Pc*-10 (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz)....171
**Figura 113.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HMBC de *Pc*-10 (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz).....172
**Figura 114.** 3,5,7,4'-tetrahidroxiflavona (Canferol).....174
**Figura 115.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-11 (δ, $CD_3OD$, 500 MHz).....175
**Figura 116.** Espectro de RMN $^{13}C$-APT de *Pc*-11 (δ, $CD_3OD$, 125 MHz).....175
**Figura 117.** Expansão do espectro de RMN $^{13}C$-APT de *Pc*-11 (δ, $CD_3OD$, 125 MHz).....176
**Figura 118.** Canferol-3-*O*-*β*-D-(6''-*E*-*p*-coumaroil) glicopiranosídeo (Tilirosídeo)....178
**Figura 119.** Espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-12 (δ, $CD_3OD$, 400 MHz).....179
**Figura 120.** Espectro de RMN $^{13}C$ de *Pc*-12 (δ, $CD_3OD$, 100 MHz).....179
**Figura 121.** Cromatograma da fração 06/08 da fase acetato de etila do EEB das partes aéreas de *Pavonia cancellata*.....180
**Figura 122.** Canferol-3-*O*-*β*-D-glicopiranosídeo (Astragalina).....182
**Figura 123.** Espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-13 (δ, $CD_3OD$, 400 MHz).....183
**Figura 124.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-13 na região entre 5,0 e 8,0 ppm (δ, $CD_3OD$, 400 MHz).....183
**Figura 125.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-13 na região entre 3,1 e 3,7 ppm (δ, $CD_3OD$, 400 MHz).....184
**Figura 126.** Espectro de RMN $^{13}C$-APT de *Pc*-13 (δ, $CD_3OD$, 100 MHz).....184
**Figura 127.** Rutina.....186
**Figura 128.** Isoquercitrina.....186
**Figura 129.** Espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-14 (δ, $CD_3OD$, 500 MHz).....189
**Figura 130.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-14 (δ, $CD_3OD$, 500 MHz).....189
**Figura 131.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-14 (δ, $CD_3OD$, 500 MHz).....190
**Figura 132.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-14 (δ, $CD_3OD$, 500 MHz).....190
**Figura 133.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-14 (δ, $CD_3OD$, 500 MHz).....191

**Figura 134.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-14 (δ, $CD_3OD$, 500 MHz).....191
**Figura 135.** Espectro de RMN $^{13}C$-APT de *Pc*-14 (δ, $CD_3OD$, 125 MHz).....192
**Figura 136.** Expansão do espectro de RMN $^{13}C$-APT de *Pc*-14 (δ, $CD_3OD$, 125 MHz).....192
**Figura 137.** Expansão do espectro de RMN $^{13}C$-APT de *Pc*-14 (δ, $CD_3OD$, 125 MHz).....193
**Figura 138.** Expansão do espectro de RMN $^{13}C$-APT de *Pc*-14 (δ, $CD_3OD$, 125 MHz).....193
**Figura 139.** Expansão do espectro de RMN $^{13}C$-APT de *Pc*-14 (δ, $CD_3OD$, 125 MHz).....194
**Figura 140.** Expansão do espectro de RMN $^{13}C$-APT de *Pc*-14 (δ, $CD_3OD$, 125 MHz).....194
**Figura 141.** Expansão do espectro de RMN $^{13}C$-APT de *Pc*-14 (δ, $CD_3OD$, 125 MHz).....195
**Figura 142.** Canferol-3-*O*-rutinosídeo.....196
**Figura 143.** Espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-15 (δ, DMSO-$d_6$, 400 MHz).....199
**Figura 144.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-15 (δ, DMSO-$d_6$, 400 MHz).....200
**Figura 145.** Espectro de RMN $^{13}C$-BB de *Pc*-15 (δ, DMSO-$d_6$, 100 MHz).....200
**Figura 146.** Espectro de RMN $^{13}C$-DEPT-135 de *Pc*-15 (δ, DMSO-$d_6$, 100 MHz).....201
**Figura 147.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HSQC de *Pc*-15 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).....201
**Figura 148.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HSQC de *Pc*-15 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).....202
**Figura 149.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HMBC de *Pc*-15 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).....202
**Figura 150.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HMBC de *Pc*-15 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).....203
**Figura 151.** Ácido Protocatecuico.....204
**Figura 152.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-16 (δ, $CD_3OD$, 500 MHz).....206
**Figura 153.** Espectro de RMN $^{13}C$-APT de *Pc*-16 (δ, $CD_3OD$, 125 MHz).....206
**Figura 154.** Espectro bidimensional de RMN $^{1}H/^{13}C$-HSQC de *Pc*-16 (δ, $CD_3OD$, 500 e 125 MHz).....207
**Figura 155.** Espectro bidimensional de RMN $^{1}H/^{13}C$-HMBC de *Pc*-16 (δ, $CD_3OD$, 500 e 125 MHz).....207

**Figura 156.** *N-trans*-feruloiltiramina.....208
**Figura 157.** *N-cis*-feruloiltiramina.....209
**Figura 158.** Espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-17 (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).....211
**Figura 159.** Expansão de espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-17 (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).....212
**Figura 160.** Expansão de espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-17 (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).....212
**Figura 161.** Expansão de espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-17 (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).....213
**Figura 162.** Espectro de RMN $^{13}C$-APT de *Pc*-17 (δ, $CDCl_3$, 100 MHz).....213
**Figura 163.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HSQC de *Pc*-17 (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz).....214
**Figura 164.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HMBC de *Pc*-17 (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz)....214
**Figura 165.** Cromatograma da fração 05/07 da fase acetato de etila do EEB das partes aéreas de *Pavonia blanchetiana*.....215
**Figura 166.** Isoquercitrina.....218
**Figura 167.** Quercitrina.....218
**Figura 168.** Espectro de RMN $^{1}H$ de *Pb*-1 (δ, DMSO-$d_6$, 500 MHz).....222
**Figura 169.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pb*-1 (δ, DMSO-$d_6$, 500 MHz).....222
**Figura 170.** Espectro de RMN $^{13}C$-APT de *Pb*-1 (δ, DMSO-$d_6$, 125 MHz).....223
**Figura 171.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HSQC de *Pb*-1 (δ, DMSO-$d_6$, 500 e 125 MHz).....223
**Figura 172.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HMBC de *Pb*-1 (δ, DMSO-$d_6$, 500 e 125 MHz).....224
**Figura 173.** Espectro de RMN $^{1}H$ de *Pb*-2 (δ, DMSO-$d_6$, 500 MHz).....224
**Figura 174.** Espectro de RMN $^{13}C$-APT de *Pb*-2 (δ, DMSO-$d_6$, 125 MHz).....225
**Figura 175.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HSQC de *Pb*-2 (δ, DMSO-$d_6$, 500 e 125 MHz).....225
**Figura 176.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HMBC de *Pb*-2 (δ, DMSO-$d_6$, 500 e 125 MHz).....226
**Figura 177.** Tilirosídeo.....227
**Figura 178.** Espectro de RMN $^{1}H$ de *Pb*-3 (δ, $CD_3OD$, 500 MHz).....229
**Figura 179.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pb*-3 (δ, $CD_3OD$, 500 MHz).....229
**Figura 180.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pb*-3 (δ, $CD_3OD$, 500 MHz).....230
**Figura 181.** Espectro de RMN $^{13}C$-APT de *Pb*-3 (δ, $CD_3OD$, 125 MHz).....230
**Figura 182**. *Trans*-tilirosídeo.....233
**Figura 183**. *Cis*-tilirosídeo.....233

**Figura 184.** Espectro de RMN $^{1}$H de *Pb*-4 (δ, DMSO-$d_6$, 500 MHz).....238
**Figura 185.** Expansão do espectro de RMN $^{1}$H de *Pb*-4 (δ, DMSO-$d_6$, 500 MHz).....238
**Figura 186.** Expansão do espectro de RMN $^{1}$H de *Pb*-4 (δ, DMSO-$d_6$, 500 MHz).....239
**Figura 187.** Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pb*-4 (δ, DMSO-$d_6$, 125 MHz).....239
**Figura 188.** Expansão do espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pb*-4 (δ, DMSO-$d_6$, 125 MHz).....240
**Figura 189.** Expansão do espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pb*-4 (δ, DMSO-$d_6$, 125 MHz).....240
**Figura 190.** Expansão do espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pb*-4 (δ, DMSO-$d_6$, 125 MHz).....241
**Figura 191.** Expansão do espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pb*-4 (δ, DMSO-$d_6$, 125 MHz).....241
**Figura 192.** Espectro de RMN $^{1}$H/$^{13}$C-HSQC de *Pb*-4 (δ, DMSO-$d_6$, 500 e 125 MHz).....242
**Figura 193.** Espectro de RMN $^{1}$H/$^{13}$C-HMBC de *Pb*-4 (δ, DMSO-$d_6$, 500 e 125 MHz).....242
**Figura 194.** Cromatograma da fase n-butanólica de *Pavonia blanchetiana*.....243
**Figura 195.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 315, referente à ionização do composto **1**.....248
**Figura 196.** Via de fragmentação do composto **1**, em IES-EM/EM modo negativo.....248
**Figura 197.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 595, referente à ionização do composto **2**.....248
**Figura 198.** Via de fragmentação do composto **2**, em IES-EM/EM modo negativo.....249
**Figura 199.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 463, referente à ionização do composto **3**.....249
**Figura 200.** Via de fragmentação do composto **3**, em IES-EM/EM modo negativo.....250
**Figura 201.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 609, referente à ionização do composto **4**.....250
**Figura 202.** Via de fragmentação do composto **4**, em IES-EM/EM modo negativo.....250
**Figura 203.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 451, referente à ionização do composto **5**.....251
**Figura 204.** Via de fragmentação do composto **5**, em IES-EM/EM modo negativo.....251
**Figura 205.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 193, referente à ionização do composto **6**.....251

**Figura 206.** Via de fragmentação do composto **6**, em IES-EM/EM modo negativo.....252
**Figura 207.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 623, referente à ionização do composto **7**.....252
**Figura 208.** Via de fragmentação do composto **7**, em IES-EM/EM modo negativo.....252
**Figura 209.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 593, referente à ionização do composto **8**.....253
**Figura 210.** Via de fragmentação do composto **8**, em IES-EM/EM modo negativo.....253
**Figura 211.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 187, referente à ionização do composto **9**.....253
**Figura 212.** Via de fragmentação do composto **9**, em IES-EM/EM modo negativo.....254
**Figura 213.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 327, referente à ionização do composto **10**.....254
**Figura 214.** Via de fragmentação do composto **10**, em IES-EM/EM modo negativo....255
**Figura 215.** Cromatograma da fase hidroalcoólica de *Pavonia blanchetiana*.....256
**Figura 216.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 315, referente à ionização do composto **11**.....259
**Figura 217.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 447, referente à ionização do composto **12**.....259
**Figura 218.** Via de fragmentação do composto **12**, em IES-EM/EM modo negativo....260
**Figura 219.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 609, referente à ionização do composto **13**.....260
**Figura 220.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 447, referente à ionização do composto **14**.....261
**Figura 221.** Via de fragmentação do composto **14**, em IES-EM/EM modo negativo....261
**Figura 222.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 623, referente à ionização do composto **15**.....261
**Figura 223.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 593, referente à ionização do composto **16**.....262
**Figura 224.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 187, referente à ionização do composto **17**.....262
**Figura 225.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 327, referente à ionização do composto **18**.....262
**Figura 226.** Atividade larvicida dos extratos de *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana* contra *Ae. aegypti* após 24 horas. CP = Controle

Positivo, CN = Controle Negativo.....263
**Figura 227.** Curva dose-resposta dos extratos de *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana* contra *Ae. aegypti* após 24 horas, expressos em $CL_{50}$.....263
**Figura 228.** Atividade larvicida das fases hexânicas de *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana* contra *Ae. aegypti* após 24 horas. CP = Controle Positivo, CN = Controle Negativo.....264
**Figura 229.** Curva dose-resposta das fases hexânicas de *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana* contra *Ae. aegypti* após 24 horas, expressos em $CL_{50}$.....265
**Figura 230.** Aspectos das larvas L4 após exposição por 24h, com as fases hexânica de cada espécie.....266
**Figura 231.** Atividade larvicida das fases clorofórmicas de *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana* contra *Ae. aegypti* após 24 horas. CP = Controle Positivo, CN = Controle Negativo.....266
**Figura 232.** Curva dose-resposta das fases clorofórmicas de *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana* contra *Ae. aegypti* após 24 horas, expressos em $CL_{50}$.....267
**Figura 233.** Aspectos das larvas após exposição por 24h com as fases mais polares do EEB.....268
**Figura 234.** Atividade larvicida das fases acetato de etila de *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana* contra *Ae. aegypti* após 24 horas. CP = Controle Positivo, CN = Controle Negativo.....268
**Figura 235.** Curva dose-resposta das fases acetato de etila de *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana* contra *Ae. aegypti* após 24 horas, expressos em $CL_{50}$.....269
**Figura 236.** Atividade larvicida das fases n-butanólica de *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana* contra *Ae. aegypti* após 24 horas. CP = Controle Positivo, CN = Controle Negativo.....269
**Figura 237.** Curva dose-resposta das fases n-butanólica de *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana* contra *Ae. aegypti* após 24 horas, expressos em $CL_{50}$.....269
**Figura 238.** Atividade larvicida das fases hidroalcoólica de *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana* contra *Ae. aegypti* após 24 horas. CP =

Controle Positivo, CN = Controle Negativo.....270
**Figura 239.** Curva dose-resposta das hidroalcoólica de *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana* contra *Ae. aegypti* após 24 horas, expressos em $CL_{50}$.....270
**Figura 240.** Estruturas químicas dos flavonoides utilizados nos ensaios de atividade larvicida frente a *Aedes aegypti*.....272
**Figura 241.** Gráfico de comparação da atividade larvicida do canferol, tilirosídeo e astragalina frente às larvas de *Aedes aegypti* após 24 h de exposição.....273

## LISTA DE QUADROS

**Quadro 1**. Estruturas químicas de algumas substâncias isoladas de espécies da família Malvaceae *sensu lato*.....41
**Quadro 2.** Eluentes utilizados e frações obtidas no primeiro fracionamento cromatográfico da fase $CHCl_3$ de *Pavonia malacophylla*.....69
**Quadro 3.** Eluentes utilizados e frações obtidas no fracionamento cromatográfico da subfração 53/63 da fase $CHCl_3$ de *Pavonia malacophylla*.....70
**Quadro 4.** Eluentes utilizados e frações obtidas no primeiro fracionamento cromatográfico da fração A-F do precipitado A de *Pavonia cancellata*.....74
**Quadro 5.** Eluentes utilizados e frações obtidas no fracionamento cromatográfico da subfração 08/09 da fração A-F do precipitado A de *Pavonia cancellata*.....74
**Quadro 6.** Eluentes utilizados e frações obtidas no fracionamento cromatográfico da subfração 24 da fração A-F do precipitado A de *Pavonia cancellata*.....75
**Quadro 7.** Eluentes utilizados e frações obtidas no fracionamento cromatográfico da subfração 07/15 da fração 24 do precipitado A de *Pavonia cancellata*.....75
**Quadro 8.** Eluentes utilizados e frações obtidas no fracionamento cromatográfico da subfração 07/15 da fração 07/15 da fração 24 do precipitado A de *Pavonia cancellata*.....76
**Quadro 9.** Eluentes utilizados e frações obtidas no fracionamento cromatográfico da fase AcOEt de *Pavonia cancellata*.....78
**Quadro 10.** Eluentes utilizados e frações obtidas no fracionamento cromatográfico da fração 03 da fase AcOEt de *Pavonia cancellata*.....78
**Quadro 11.** Eluentes utilizados e frações obtidas no primeiro fracionamento cromatográfico da fase $CHCl_3$ de *Pavonia cancellata*.....79
**Quadro 12.** Eluentes utilizados e frações obtidas no primeiro fracionamento cromatográfico da fração 18/21 da fase $CHCl_3$ de *Pavonia cancellata*.....80
**Quadro 13.** Eluentes utilizados e frações obtidas no fracionamento cromatográfico da subfração 14/21 da fase $CHCl_3$ de *Pavonia cancellata*.....80
**Quadro 14.** Eluentes utilizados e frações obtidas no fracionamento cromatográfico da fase AcOEt de *Pavonia blanchetiana*.....82
**Quadro 15.** Eluentes utilizados e frações obtidas no fracionamento cromatográfico da subfração 10/12 da fase AcOEt de *Pavonia blanchetiana*.....82
**Quadro 16.** Substâncias isoladas das partes aéreas de *Pavonia malacophylla*.....88
**Quadro 17.** Substâncias isoladas das partes aéreas de *Pavonia cancellata*.....111
**Quadro 18**. Substâncias isoladas das partes aéreas de *Pavonia blanchetiana*.....215
**Quadro 19.** Substâncias anotadas na fase n-butanólica de *Pavonia blanchetiana*.....247
**Quadro 20.** Substâncias anotadas na fase hidroalcoólica de *Pavonia blanchetiana*.....257

## LISTA DE TABELAS

**Tabela 1.** Substâncias isoladas de espécies da família Malvaceae *sensu lato* e suas atividades biológicas relatadas.....39
**Tabela 2.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pm*-1** (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (ácido 3-*O*-cafeoilquínico metil éster) (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz) (GE et al., 2024).....91
**Tabela 3.** Compilação dos dados de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$, HSQC e HMBC de ***Pm*-1** (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).....92
**Tabela 4.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pm*-2** (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (ácido 3-*O*-cafeoilquínico metil-éster) (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz) (GE et al., 2018).....96
**Tabela 5.** Compilação dos dados de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$, HSQC e HMBC de ***Pm*-2** (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).....97
**Tabela 6.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pm*-3** (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (ácido 5-*O*-cafeoilquínico) (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz) (BAJKO et al., 2015).....102
**Tabela 7.** Compilação dos dados de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$, HSQC e HMBC de ***Pm*-3** (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).....102
**Tabela 8.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pm*-4** (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (ácido 4-*O*-cafeoilquínico metil-éster) (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz) (GE et al., 2018).....107
**Tabela 9.** Compilação dos dados de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$, HSQC e HMBC de ***Pm*-4** (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).....108
**Tabela 10.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-1a e *Pc*-1b** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (δ, $C_5D_5N$, 500 e 125 MHz) (OLIVEIRA et al., 2025) e ***Mo*-2** (δ, $C_5D_5N$, 500 e 125 MHz) (FERNANDES et al., 2018).....115
**Tabela 11.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-2a** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (δ, $CDCl_3$, 300 e 75 MHz) (GOMES, et al., 2005).....120
**Tabela 12.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-2b** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) (FERREIRA et al., 2019).....121
**Tabela 13.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-2c** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) (FERNANDES et al., 2018).....121
**Tabela 14.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-3** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) (FERNANDES et al., 2018).....126
**Tabela 15.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-3** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) (FERNANDES, et al., 2018).....127
**Tabela 16.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-4a** e ***Pc*-4b** (δ, $CDCl_3$, 500 e 125 MHz) com o modelo ***Mo*-1a** e ***Mo*-1b** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) (FERNANDES, et al., 2018).....133
**Tabela 17.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-4a** e ***Pc*-4b** (δ, $CDCl_3$, 500 e 125 MHz) com o modelo ***Mo*-1a** e ***Mo*-1b** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) (FERNANDES, et al., 2018).....135

**Tabela 18.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-5** (δ, $CDCl_3$, 500 e 125 MHz) com modelo da literatura ***Mo*-1** (TELES et al., 2015) e ***Mo*-2** (OLIVEIRA et al., 2025).....140
**Tabela 19.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-6** (δ, $CDCl_3$, 500 e 125 MHz) com ***Pc*-5** e com o modelo ***Mo*-1** (OLIVEIRA et al., 2025).....144
**Tabela 20.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-7** (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz) (TELES et al., 2015) ***Mo*-2** (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz) (SILVA et al., 2009).....149
**Tabela 21.** Dados espectrais de HSQC e HMBC de ***Pc*-7** (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).....150
**Tabela 22.** Dados obtidos pela análise de CG-EM.....156
**Tabela 23.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-9** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) (FERNANDES et al., 2018).....160
**Tabela 24.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-10** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) com modelos da literatura ***Mo*-1** e ***Mo*-2** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) (PEI et al., 2007).....165
**Tabela 25.** Dados espectrais de HSQC e HMBC de ***Pc*-10** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz).....166
**Tabela 26.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-11** (δ, $CD_3OD$, 500 e 125 MHz) com modelo da literatura ***Mo*-1** (δ, $CD_3OD$, 500 e 125 MHz) (ALBUQUERQUE et al., 2022).....174
**Tabela 27.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-12** (δ, $CD_3OD$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (NHUNG et al., 2023).....178
**Tabela 28.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-13** (δ, $CD_3OD$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (δ, $CD_3OD$, 500 e 125 MHz) (DANTAS, 2018).....182
**Tabela 29.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-14** (δ, $CD_3OD$, 500 e 125 MHz) com modelos da literatura ***Mo*-1** e ***Mo*-2** (δ, $CD_3OD$, 500 e 125 MHz) (KIM et al., 2017; WAN et al., 2012).....187
**Tabela 30.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-15** (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz) com modelo da literatura ***Mo*-1** (δ, DMSO-$d_6$, 300 e 125 MHz) (OSW & HUSSAIN, 2020).....197
**Tabela 31.** Dados espectrais de HSQC e HMBC de ***Pc*-15** (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).....198
**Tabela 32.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-16** (δ, $CD_3OD$, 500 e 125 MHz) com modelo da literatura *Mo*-1 (δ, $CD_3OD$, 500 e 125 MHz) (LEE et al., 2011).....205
**Tabela 33**. Dados comparativos de HSQC e HMBC (δ, $CD_3OD$, 500 e 125 MHz) de ***Pc*-16**.....205
**Tabela 34.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-17a** e ***Pc*-17b** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** e ***Mo*-2** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) (BRITO, 2021).....210
**Tabela 35.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pb*-1** (δ, DMSO-$d_6$, 500 e 125 MHz) e ***Pb*-2** (δ, DMSO-$d_6$, 500 e 125 MHz) com modelos da literatura ***Mo*-1** (δ, DMSO-$d_6$, 500 e 125 MHz) (WAN et al., 2012) e ***Mo*-2** ($CD_3OD$, 500 e 125 MHz) (PHOOPHA et

al., 2020).....219
**Tabela 36.** Dados espectrais de HSQC e HMBC de ***Pb*-1 e *Pb*-2** (δ, DMSO-$d_6$, 500 e 125 MHz).....220
**Tabela 37.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pb*-3** (δ, $CD_3OD$, 500 e 125 MHz) com modelos da literatura ***Mo*-1** (δ, $CD_3OD$, 600 e 150 MHz) (NHUNG et al., 2023).227
**Tabela 38.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pb*-4a** e ***Pb*-4b** (δ, DMSO-$d_6$, 500 e 125 MHz) com modelos da literatura ***Mo*-1** (δ, DMSO-$d_6$, 500 e 125 MHz) (SANTOS-JÚNIOR et al., 2018).....234
**Tabela 39.** Dados espectrais de HSQC e HMBC de ***Pb*-4a e 4b** (δ, DMSO-$d_6$, 500 e 125 MHz).....236
**Tabela 40.** Íons *m/z* $[M-H]^-$, Fragmentos $MS^2$ dos compostos obtidos por CLAE-EM/EM da Fase n-butanólica de *Pavonia blanchetiana*.....247
**Tabela 41.** Íons *m/z* $[M-H^l]^-$, Fragmentos $MS^2$ dos compostos obtidos por CLAE-EM/EM da Fase hidroalcoólica de *Pavonia blanchetiana*.....258

# 1. Introdução



Adotar as plantas medicinais como alternativa terapêutica para amenizar e curar doenças pode ser considerada a prática mais antiga realizada pela humanidade. Este fato pode ser ratificado pelos registros encontrados do uso de espécies vegetais que são utilizadas pelo homem para a cura das suas enfermidades corporais ou queixas psíquicas, preparadas nas suas mais diversas formas, seja com uma das suas partes ou com toda droga vegetal (DONADEL, et al., 2022; ŠANTIĆ, et al., 2017).

Os seus efeitos terapêuticos ou tóxicos, foram sendo observados e comprovados ao longo dos anos por meio de experimentos científicos (GHAVAM-HAGHI & DINANI, 2017). A medicina popular e os estudos etnofarmacológicos em todo o mundo abriram as portas para a descoberta de novas drogas provenientes das ervas medicinais (TABARI, et al., 2021).

Entre os problemas de saúde enfrentados pela população mundial destaca-se a incidência de arboviroses causadoras da dengue, zika e chikungunya, cujo principal vetor do vírus é o *Aedes aegypti* (L.) representando assim um crescente problema de saúde pública no mundo, devido ao seu potencial de dispersão, capacidade de adaptação a novos ambientes e hospedeiros, onde a sua principal forma de combate continua sendo o controle desses vetores (DONALISIO; FREITAS; ZUBEN, 2017), destacando a descoberta, recente, pelo Instituto Butantan da vacina para combater o vírus e que será utilizada para imunizar a população.

Diante da ampla diversidade de espécies vegetais com potencial terapêutico no território brasileiro, destacam-se, sob os aspectos químicos e farmacológicos, as espécies da família Malvaceae. Entre elas, podem ser citadas *Helicteres velutina*, utilizada na medicina popular por sua ação inseticida e repelente (FERNANDES et al., 2018); *Sida rhombifolia*, com atividade vasorrelaxante (CHAVES et al., 2013; 2017); *Sida galheirensis*, que apresenta ação antioxidante (SILVA et al., 2006); *Sidastrum paniculatum*, com propriedades leishmanicida, citotóxica e anti-inflamatória (CAVALCANTE et al., 2010; TELES et al., 2015); e *Pavonia glazioviana*, reconhecida por sua atividade antimicrobiana (OLIVEIRA et al., 2025).

Nesse contexto, e considerando a relevância farmacológica e biológica das espécies pertencentes à família Malvaceae, destaca-se o gênero *Pavonia*, que apresenta amplo potencial terapêutico. Assim, realizou-se um estudo fitoquímico das partes aéreas de três espécies desse gênero: *Pavonia malacophylla* (Link & Otto Garcke), *Pavonia cancellata* (L.) e *Pavonia blanchetiana* (Miq.), conhecidas popularmente, como malva-veludo ou malva-rosa, corda-de-viola ou malva-rasteira e algodão-bravo,

respectivamente.

O estudo de espécies da família Malvaceae, em particular do gênero *Pavonia*, é motivado pelo seu amplo potencial terapêutico, o que inclui a investigação de metabólitos secundários responsáveis por diversas atividades biológicas, como efeitos larvicidas. Nesse contexto, os flavonoides, terpenoides, alcaloides, lignanas, cumarinas, quinonas e saponinas têm sido descritos na literatura como compostos com atividade larvicida frente ao *Aedes aegypti* (GARCEZ et al., 2013).

Fernandes et al. (2018) relataram atividade larvicida *in vitro* contra larvas em estágio L4 de *Ae. aegypti* a partir do extrato etanólico bruto das partes aéreas de *Helicteres velutina*, bem como dos compostos isolados *β*-sitosterol glicosilado, tilirosídeo e 7,4'-di-*O*-metil-8-*O*-sulfato flavona. Adicionalmente, um estudo *in silico* conduzido por Marques et al. (2022) evidenciou o potencial de flavonoides sulfatados isolados das partes aéreas de *Sidastrum paniculatum* (wissadulina, beltraonina, paniculatumina, yanina, condadina e 7,4'-di-*O*-metil-8-*O*-sulfato flavona) em se ligarem a proteínas-alvo do mosquito vetor das principais arboviroses, como dengue, zika e chikungunya.

Diante desta problemática e visando novos meios de combate ao *Ae. aegypti*, foi investigado o potencial de novas espécies vegetais por meio de seus extratos, fases e metabólitos secundários biologicamente ativos isolados através de pesquisas já desenvolvidas por membros da nossa equipe. Este estudo propõe fortalecer o perfil quimiotaxonômico da família Malvaceae, além de buscar, aqui, o potencial biológico das três espécies frente às larvas L4 de *Ae. Aegypti*, visto que em estudos anteriores da equipe revelou o potencial larvicida de espécies da referida família (FERNANDES et al., 2018; 2019; 2021; FERREIRA, et al., 2019; MARQUES et al., 2022).

# 2. Objetivos

## 2.1 Objetivo Geral

O desenvolvimento desse estudo teve como objetivo geral contribuir para com o conhecimento científico da família Malvaceae, através de um estudo fitoquímico de três espécies do gênero *Pavonia*: *Pavonia malacophylla* (Link & Otto) Garcke, *Pavonia cancellata* (L.), e a espécie *Pavonia blanchetiana* (Miq.), explorando através de um estudo pioneiro o potencial larvicida dos seus extratos, fases e compostos isolados, vislumbrando encontrar novas fontes alternativas de combate ao vetor *Aedes aegypti* L.

## 2.2 Objetivos Específicos

- Obter os extratos etanólicos brutos das partes aéreas das três espécies;
- Isolar, purificar e caracterizar estruturalmente os constituintes químicos das partes aéreas de três espécies pertencentes ao gênero *Pavonia*, buscando conhecer, através de métodos cromatográficos (CC, CLAE) e espectroscópicos (RMN $^{1}H$ e $^{13}C$) o perfil de metabólitos secundários produzidos pelas espécies;
- Avaliar o potencial larvicida dos extratos, das fases e dos compostos isolados em *Aedes aegypti* L.

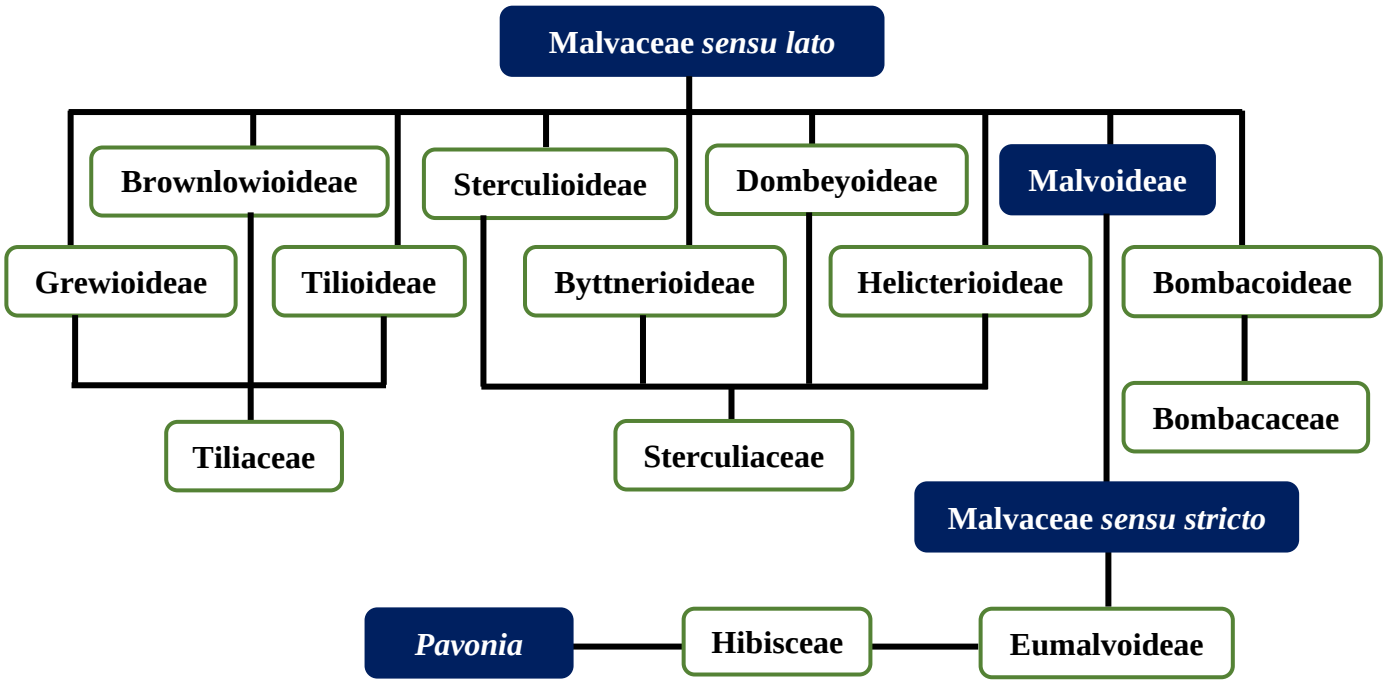
# 3. Referencial Teórico

### 3.1 Considerações sobre a família Malvaceae *sensu lato*

Estudos detalhados de filogenia baseados em dados moleculares e pesquisas com dados anatômicos, biogeográficos, químicos e morfológicos mostraram uma relação filogenética entre as famílias Bombacaceae, Sterculiaceae, Tiliaceae e Malvaceae, constituindo a maior família inserida na ordem Malvales. Segundo os sistemas de classificação Angiosperm Phylogeny Group (APG) I (1998), APG II (2003), APG III (2009) e APG IV (2016), a família Malvaceae *sensu lato* pode ser dividida em 9 subfamílias (Grewioideae, Brownlowioideae, Tilioideae, Sterculioideae, Byttnerioideae, Dombeyoideae, Helicteroideae, Malvoideae e Bombacoideae) (SILVA, 2014; STEVENS, 2017) (Esquema 1, pág. 37).

A Etnofarmacologia, destaca o uso medicinal de espécies da família Malvaceae *sensu lato* para a cura das mais variadas doenças. Esse destaque vem sendo reforçado por comprovações científicas de seu emprego na terapêutica. Esta família caracteriza-se por apresentar uma ampla distribuição pantropical, com 245 gêneros e 4.465 espécies, disseminadas mundialmente pelas regiões tropicais e subtropicais, e menos frequentes nas regiões temperadas (THE PLANT LIST, 2013) (Figura 1, pág. 38).

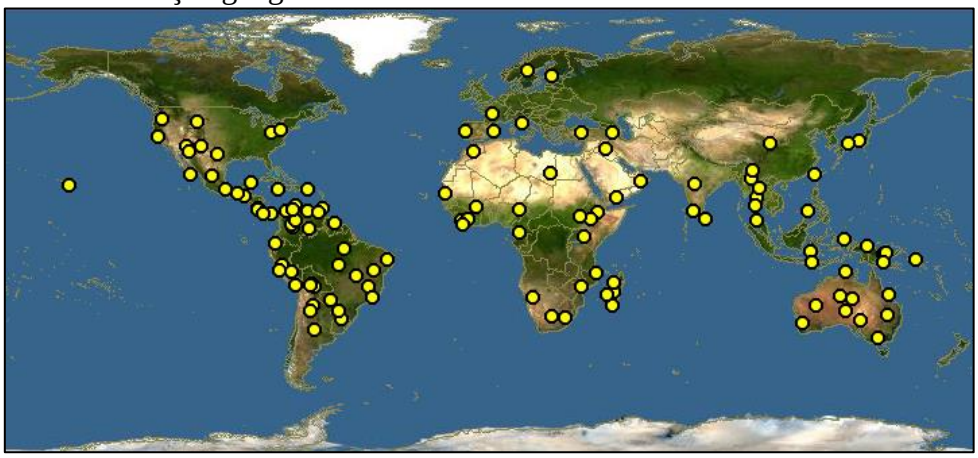
**Esquema 1.** Classificação filogenética da família Malvaceae *sensu lato*.




**Fonte:** Adaptado de APG IV, 2016.

No Brasil, esta família está representada por 85 gêneros e 912 espécies, sendo 7 gêneros e 477 espécies endêmicas do país com distribuição fitogeográfica em todo o território nacional, o que evidencia a grande diversidade da flora brasileira (FLORA DO BRASIL, 2020).

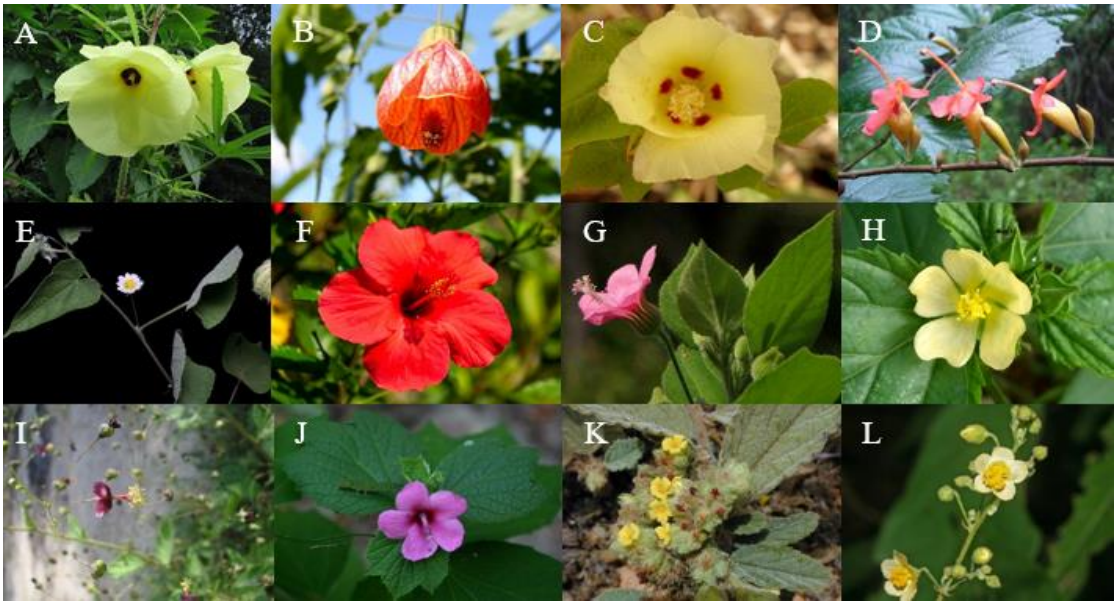
**Figura 1.** Distribuição geográfica da Família Malvaceae *sensu lato.*



**Fonte:** https://www.discoverlife.org/mp/20m?kind=Malvaceae (Acesso em: 08/12/2025).

Entre os gêneros desta família estão: *Abelmoschus*, *Abutilon*, *Gossypium*, *Helicteres*, *Herissantia*, *Hibiscus*, *Pavonia*, *Sida*, *Sidastrum*, *Urena*, *Waltheria* e *Wissadula* (Figura 2, pág. 38).

**Figura 2.** Gêneros pertencentes à Família Malvaceae *sensu lato.*




(A) *Abelmoschus*, (B) *Abutilon*, (C) *Gossypium*, (D) *Helicteres*, (E) *Herissantia*, (F) *Hibiscus*, (G) *Pavonia*, (H) *Sida*, (I) *Sidastrum*, (J) *Urena*, (K) *Waltheria*, (L) *Wissadula.*

**Fonte**: https://www.discoverlife.org (Acesso em: 08/12/2025).

Várias espécies pertencentes à família Malvaceae *sensu lato* apresentam relatos de constituintes químicos que foram descritos na literatura no combate a diversas enfermidades, como: compostos fenólicos (TELES et al., 2015; ALBUQUERQUE et al., 2025), alcaloides (OLIVEIRA et al., 2025; CHAVES et al, 2013; 2017), flavonoides sulfatados (FERNANDES et al., 2018; MARQUES et al., 2022), terpenoides (TELES, et al., 2014) e feofitinas (ALBUQUERQUE et al., 2025) (Tabela 1, págs. 39-40; Quadro 1, págs. 41-42).

Atividades biológicas foram encontradas e comprovadas cientificamente com diferentes espécies de Malvaceae, entre elas se pode destacar a atividade leishmanicida de *Sidastrum paniculatum* (TELES et al., 2015), atividade larvicida de *Helicteres velutina*, *Waltheria viscosissima* e *Sidastrum paniculatum* contra o mosquito *Aedes aegypti* (FERNANDES et al., 2018; FERREIRA et al., 2019; MARQUES et al., 2022), atividade vasorrelaxante de *Sida rhombifolia* e seus alcaloides (CHAVES et al., 2013, 2017), anti-inflamatória de *Wissadula periplocifolia* (TELES et al., 2015) e antimicrobiana de *Sidastrum micranthum* (GOMES et al., 2015). Dessa maneira, espécies de Malvaceae se tornam foco de estudos científicos a fim de comprovar suas utilizações na medicina popular.

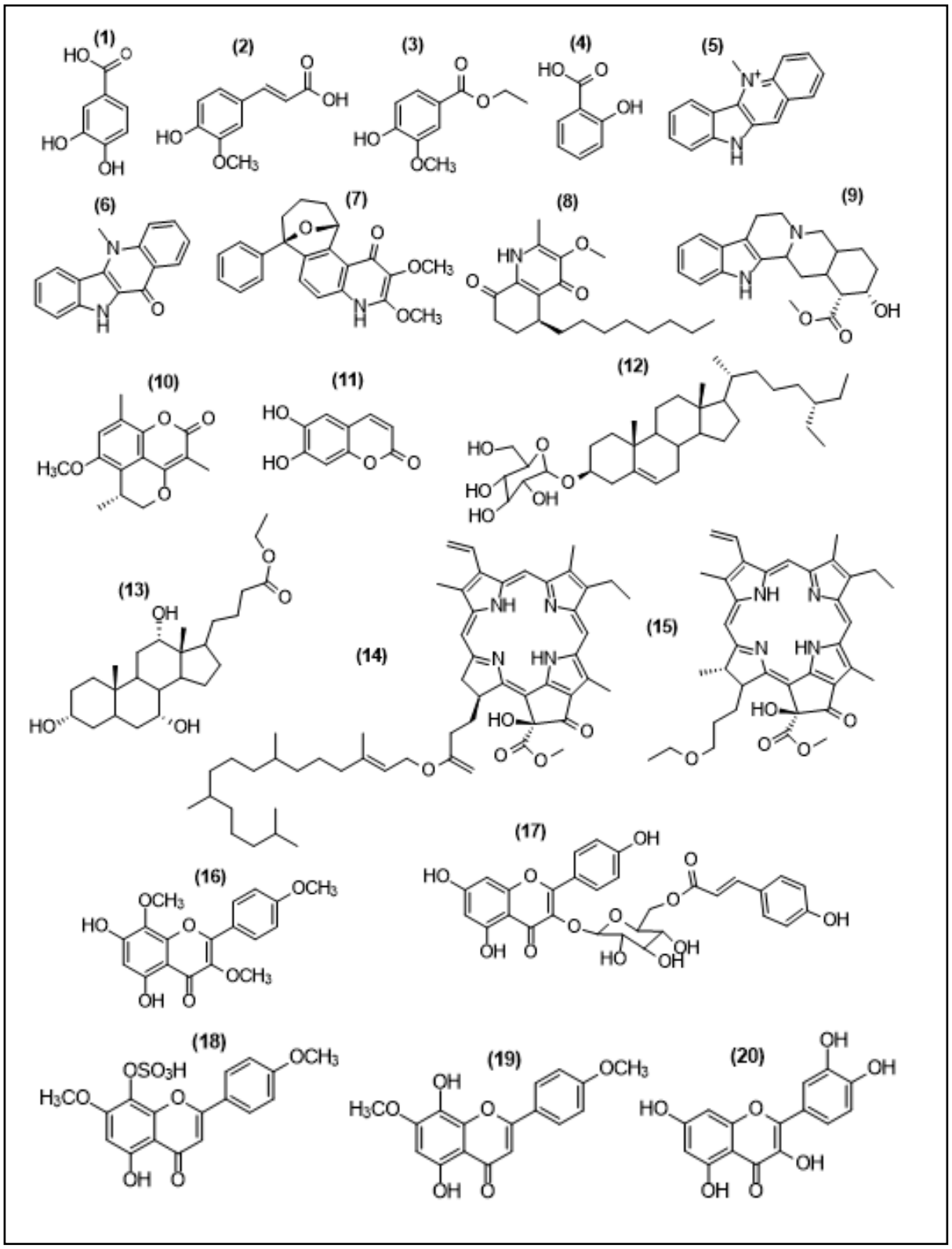
**Tabela 1.** Substâncias isoladas de espécies da família Malvaceae *sensu lato* e suas atividades biológicas relatadas.

| Classes | Constituintes Químicos | Fontes | Atividades Farmacológicas | Referências |
|---|---|---|---|---|
| **Ácidos fenólicos** | Ácido 3,4-dihidroxibenzoico **(1)** | *Eriotheca pubescens* | Antioxidante | MACHADO et al., 2016 |
| | Ácido ferúlico **(2)** | *Pavonia sepioides* | | GASCA, et al., 2013 |
| | Vanilato de etila **(3)** | *Chorisia chodatii* | | REFAAT et al., 2015 |
| | Ácido salicílico **(4)** | *Abutilon hirtum* | Antimicrobiana | GOMAA et al., 2022 |
| **Alcaloides** | Sal da Criptolepina **(5)** | *Sida rhombifolia* | Vasorrelaxante | CHAVES et al., 2013; 2017 |
| | Criptolepinona **(6)** | | | |
| | Waltheriona C **(7)** | *Melochia umbellata* | Anti-HIV | JADULCO et al., 2014 |
| | Antidesmona **(8)** | *Waltheria brachypetala* | Herbicida | SAMPAIO et al., 2016 |
| | Yohimbina **(9)** | *Helicteres isora* | Antidiabética | ALEYKUTTY et al., 2012 |
| **Cumarinas** | Mansorina II **(10)** | *Mansonia gagei* | Anticâncer (câncer colorretal) | BAGHDADI et al., 2018 |
| | Esculetina **(11)** | *Chorisia chodatii* | Antioxidante | REFAAT et al., 2015 |

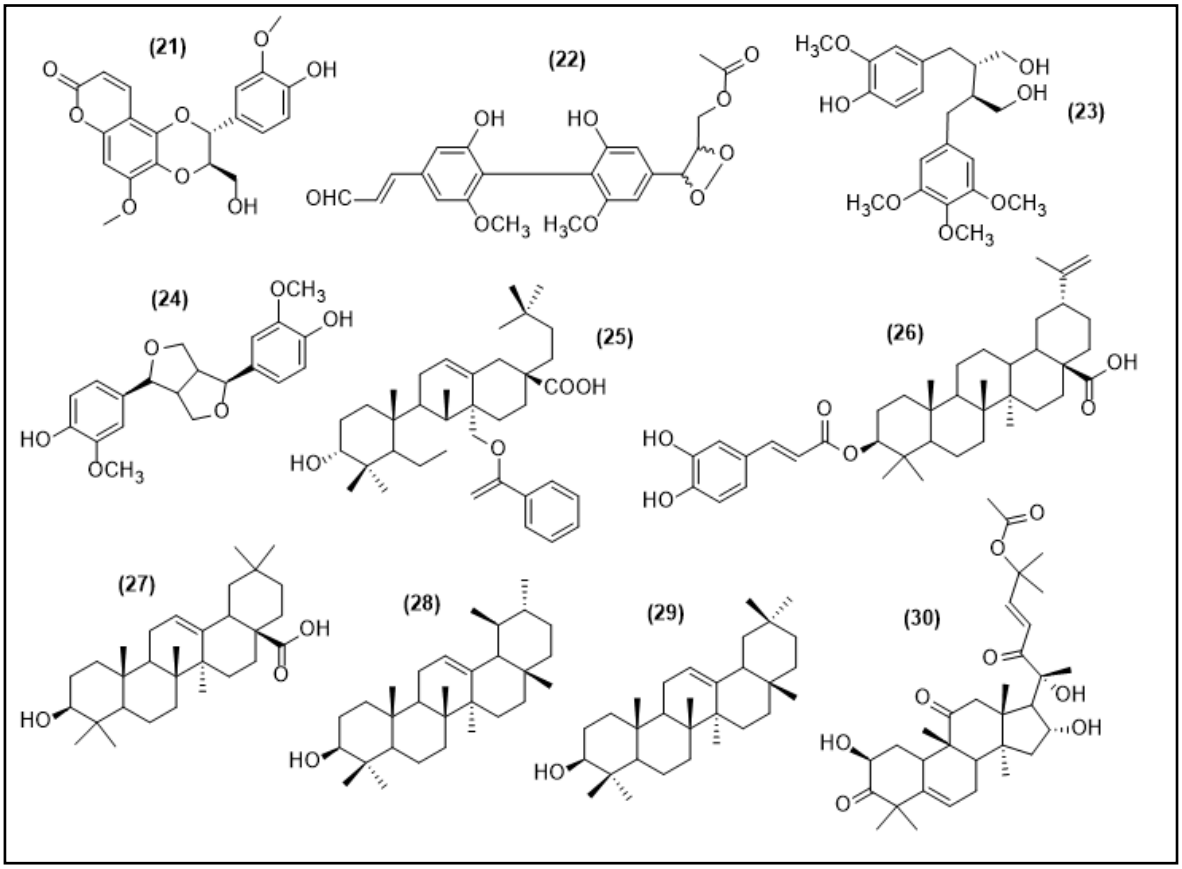
**Tabela 1.** Substâncias isoladas de espécies da família Malvaceae *sensu lato* e suas atividades biológicas relatadas (cont.).

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| **Esteroides** | *β*-sitosterol glicosilado **(12)** | *Helicteres velutina* | Larvicida | FERNANDES et al., 2019 |
| | Etil-isoallocolato **(13)** | *Pavonia odorata* | Antitumoral, antibacteriana | SARAVANAN, et al., 2014 |
| **Feofitinas** | $13^2$-*S*-hidroxi-feofitina *a* **(14)** | *Sidastrum micranthum* | Antimicrobiana | GOMES, et al., 2015 |
| | $13^2$(*S*)-hidroxi-($17^3$)-etoxifeoforbídeo a **(15)** | *Sidastrum paniculatum* | Leishmanicida | TELES, et al., 2015 |
| **Flavonoides** | 5,7-dihidroxi-3,8,4'-trimetoxi flavona **(16)** | *Pavonia glazioviana* | Antimicrobiana | OLIVEIRA et al., 2025 |
| | Tilirosídeo **(17)** | *Pavonia varians* | Antidiabética | FERNANDO et al., 2020 |
| | 7,4'-di-*O*-metil-8-*O*-sulfato flavona **(18)** | *Sidastrum paniculatum* | Larvicida | MARQUES et al., 2022 |
| | 7,4'-di-*O*-metilisoescutelareína **(19)** | | Leishmanicida, anti-inflamatória | TELES, et al., 2015 |
| | Quercetina **(20)** | *Eriotheca pubescens* | Antioxidante | MACHADO et al., 2016 |
| **Lignoides** | (+)-4-*O*-metil-5'-metoxi-secoisolariciresinol **(21)** | *Hibiscus sabdariffa* | Antioxidante | THIEN et al., 2019 |
| | 9′-*O*-acetilmansoxetano **(22)** | *Mansonia gagei* | | LE et al., 2024 |
| | Walthindicina A **(23)** | *Waltheria indica* | | LIU et al., 2022 |
| | (+/-)-pinoresinol **(24)** | *Helicteres hirsuta* | Anticâncer (câncer de pulmão e mama) | CHIN et al., 2006 |
| **Terpenos** | Metil helicterilato **(25)** | *Helicteres angustifolia* | Hepatoprotetora | ZHANG et al., 2018 |
| | Ácido piracrênico **(26)** | *Helicteres angustifolia* | Anticâncer (câncer colorretal) | PAN et al., 2008 |
| | Ácido oleanólico **(27)** | *Helicteres isora* | Antimicrobiana | KUMAR et al., 2017 |
| | *α* e *β*-amirina **(28, 29)** | *Pavonia malacophylla* | | ALBUQUERQUE et al., 2025 |
| | Cucurbitacina B **(30)** | *Helicteres angustifolia* | Anticâncer (carcinoma hepatocelular e carcinoma maligno) | CHEN et al., 2006 |

**Quadro 1**. Estruturas químicas de algumas substâncias isoladas de espécies da família Malvaceae *sensu lato*.



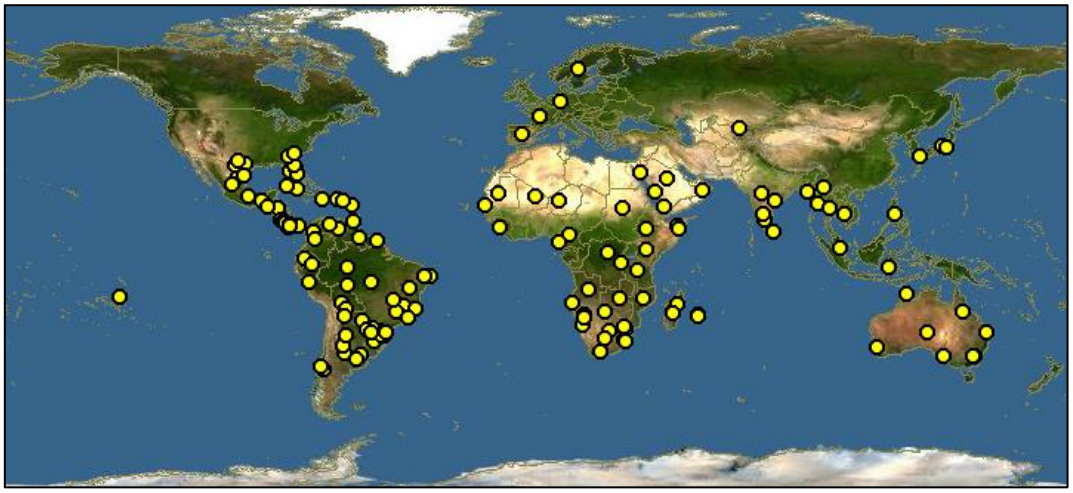
**Quadro 1**. Estruturas químicas de algumas substâncias isoladas de espécies da família Malvaceae *sensu lato* (cont.).




### 3.2 Considerações sobre o gênero *Pavonia* Cav.

O gênero *Pavonia* abrange cerca de 280 espécies distribuídas no Velho e Novo Mnundo. Aproximadamente 223 espécies estendem-se dos Estados Unidos às Antilhas, disseminando-se até o Uruguai. No Brasil o gênero *Pavonia* é nativo, mas não endêmico, correspondendo à aproximadamente 136 espécies com ampla distribuição fitogeográfica, se propagando por todo o território nacional, especialmente nas regiões Nordeste e Sudeste. Sua concentração ocorre em áreas de campos rupestres, cerrados de altitudes e caatingas que se estendem desde a cadeia do Espinhaço de Minas Gerais até a Bahia. Ocorrem também em áreas da Mata Atlântica estendendo-se desde o sul da Bahia até São Paulo, principalmente nos cerrados dos estados de São Paulo e Minas Gerais (ESTEVES, 2015) (Figura 3, pág. 43).

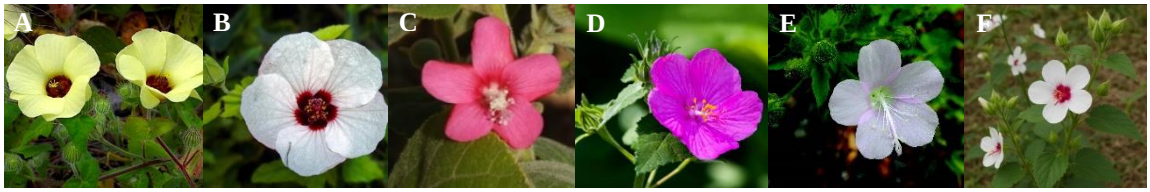
**Figura 3.** Distribuição geográfica do gênero *Pavonia* Cav.



**Fonte**: https://www.discoverlife.org/mp/20m?kind=Pavonia (Acesso em: 08/12/2025).

Este gênero é composto por ervas, subarbustos ou arbustos, que possuem folhas de lâminas inteiras e sem nectários. Algumas características são comuns entre as espécies de *Pavonia*: suas flores são geralmente solitárias, com quatro epicálices; possuem múltiplas bractéolas livres, um cálice em número de cinco; são tubulosas e cupuliformes, com carpelos uniovulados e estigmas capitados. Seus frutos são esquizocárpicos, compostos de cinco mericarpos com face dorsal nervada-reticulada, com as faces laterais lisas e glabras. Suas sementes caracterizam-se por serem lisas ou estriadas e reniformes (ESTEVES & KRAPOVICKAS, 2009).

**Figura 4.** Espécies pertencentes ao gênero *Pavonia.*




(A) *Pavonia cancellata,* (B) *Pavonia hastata,* (C) *Pavonia malacophylla,* (D) *Pavonia lasiopetala,* (E) *Pavonia odorata,* (F) *Pavonia zeylanica.*

**Fonte**: https://www.discoverlife.org (Acesso em: 08/12/2025).

Diversas espécies do gênero *Pavonia* têm sido amplamente reconhecidas na literatura por suas notáveis atividades terapêuticas (Figura 4, pág. 43). O extrato etanólico da *Pavonia alnifolia*, por exemplo, demonstrou atividade hipotensora dependente da dose e efeitos gastroprotetores, atribuídos ao elevado teor de compostos fenólicos presentes na planta (ANDRADE et al., 2012). Já o heterosídeo flavonoídico tilirosídeo, isolado da

*Pavonia varians*, revelou uma atividade hipoglicemiante promissora em estudos *in silico* (FERNANDO et al., 2020). Além disso, o extrato aquoso das folhas de *Pavonia lasiopetala* apresentou atividade antiurolitiática significativa em ensaios *in vitro* (RAMPRASAD et al., 2019). Esses achados reforçam o potencial terapêutico das espécies de *Pavonia*, com aplicações que vão desde o controle da hipertensão até a prevenção de distúrbios urológicos.

Adicionalmente, o artigo de revisão (Anexo 1, pág. 300), revela uma análise abrangente sobre o gênero *Pavonia*, reunindo e discutindo o uso popular e as propriedades farmacológicas de suas espécies, além do isolamento das substâncias bioativas presentes nas espécies do gênero *Pavonia* e seus potenciais terapêuticos, permitindo, portanto, uma visão crítica e atualizada do tema. Essa revisão contribui para o entendimento mais aprofundado das espécies de *Pavonia*, despertando a curiosidade e as oportunidades para novos estudos que muito contribuirão para a área de terapias naturais.

### 3.3 Considerações sobre a espécie *Pavonia malacophylla* (Link & Otto) Garcke

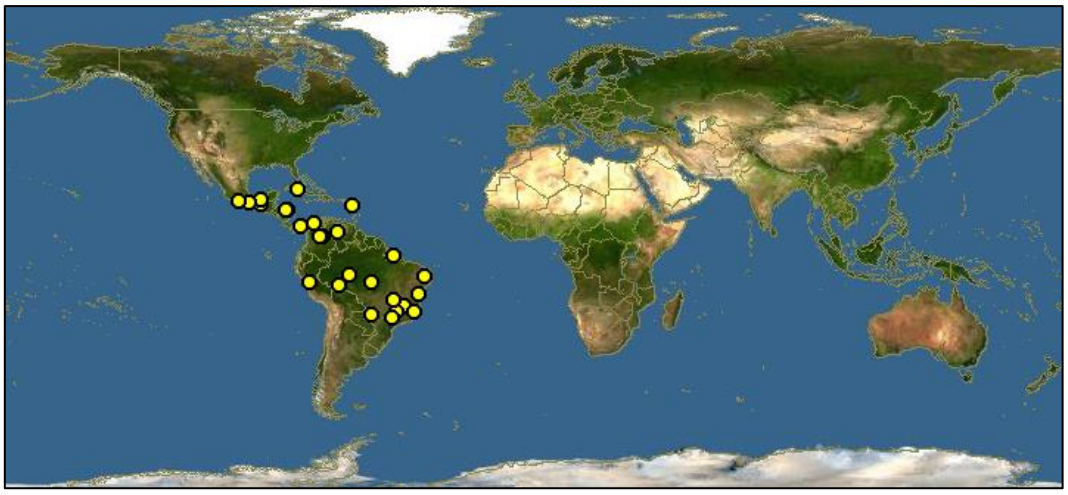
A espécie *Pavonia malacophylla* Link & Otto Garcke é popularmente conhecida como malva-veludo ou malva-rosa, que floresce em ambientes de pastos e matas. Suas folhas e raízes tem sido utilizadas para o tratamento de tosse e gripe sob a forma de xarope, além do uso de suas folhas cruas para tratar dor no coração, no entanto as investigações fitoquímicas sobre essa espécie ainda são escassas (RIBEIRO et al., 2014; FURTADO; SOUZA; BERG, 1978).

Esta espécie se apresenta como um subarbusto perene, distribuída por quase todos os estados brasileiros, sendo nativa do país, mas não endêmica. Seus domínios fitogeográficos estão distribuídos pela Amazônia, Caatinga, Mata Atlântica e Cerrado, sendo presentes na região Norte (com exceção do Acre), região Nordeste (com exceção dos estados do Piauí e Rio Grande do Norte), região Sudeste e raramente regiões Centro-Oeste e Sul (BOVINI; OKANO; VIEIRA, 2001) (Figura 5, pág. 45).

Quanto à sua morfologia, apresenta um caule ramificado desde a base, com ramos cilíndricos e revestidos por tricomas glandulares. Suas folhas são simples, alternadas e helicoidais, com pecíolo longo e estípulas lineares. As flores são constituídas por um pedúnculo mais longo que o pecíolo, epicálice com aproximadamente 20 brácteas recobrindo o cálice, que é formado por 5 sépalas soldadas, corola rósea com 5 pétalas unidas na base, seu androceu possui estames soldados em tubo e gineceu pentacarpelar.

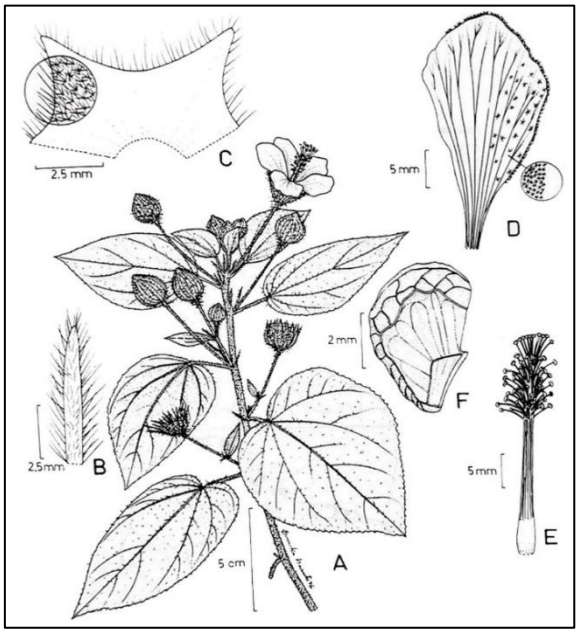
O fruto é seco do tipo esquizocarpo, constituído por 5 carpídios enegrecidos e brilhantes, em que há propagação por meio da liberação das sementes (MOREIRA, 2011) (Figura 6, pág. 45).

**Figura 5.** Distribuição geográfica da espécie *Pavonia malacophylla*.



**Fonte**: https://www.discoverlife.org/mp/20m?kind=Pavonia+malacophylla (Acesso em: 08/12/2025).

**Figura 6.** Caracterização botânica da espécie *Pavonia malacophylla*.






A: Hábito
B: Bractéola do epicálice, face dorsal
C: Parte do cálice, vista externa
D: Pétala, face dorsal
E: Tubo estaminal, estiletes e estigmas
F: Mericarpo

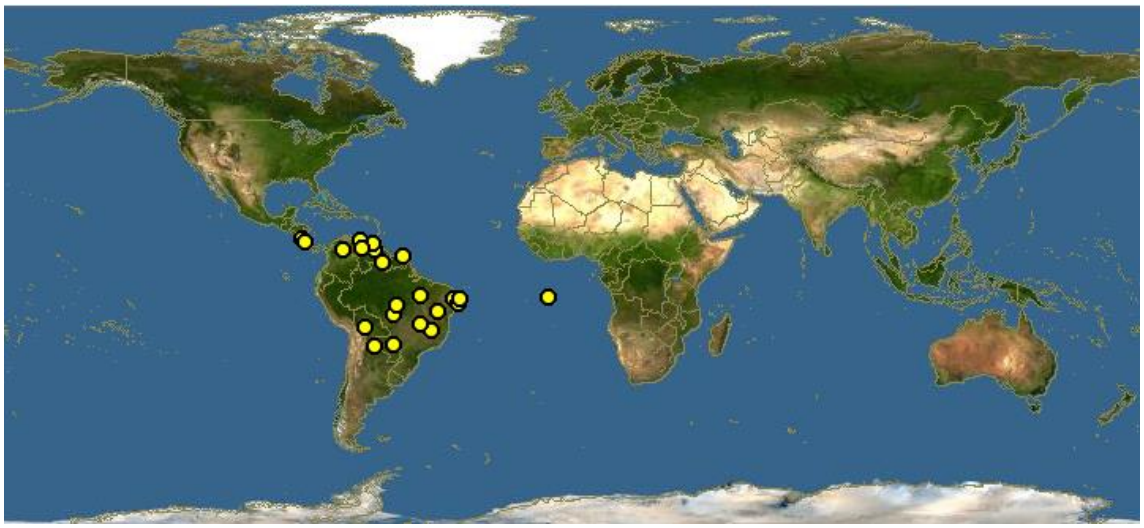
**Fonte:** https://www.biodiversity4all.org/observations/278222471 (Acesso em: 08/12/2025).

Uma triagem fitoquímica realizada com a espécie por Lima et al., (2017) revelou a presença de flavonoides, cumarinas, esteroides, triterpenos, alcaloides, além de um elevado teor de outros compostos fenólicos, sendo estes relacionados à atividade antioxidante. Estudo fitoquímico realizado por Chaves (2014; 2016) e Albuquerque et al. (2025) com as partes aéreas desta espécie levou ao isolamento e à caracterização estrutural de esteroides, triterpenos, derivados da clorofila, flavonoides glicosilados e ácidos fenólicos.

### 3.4 Considerações sobre a espécie *Pavonia cancellata* (L.)

A espécie *Pavonia cancellata* (L.) é popularmente conhecida como malva-rasteira ou corda-de-viola. Suas folhas são utilizadas na medicina popular sob a forma de cataplasmas para o tratamento de furúnculos (AGRA et al., 2007). É nativa, porém não endêmica do Brasil, e está distribuída por todo o Nordeste, com exceção do Estado do Rio Grande do Norte, por todos os estados das regiões Centro-Oeste e Sudeste, e na região Norte, é encontrada apenas no Amazonas e no Pará. Seus domínios fitogeográficos distribuem-se pela Amazônia, Caatinga, Cerrado e Mata Atlântica (FLORA DO BRASIL, 2020) (Figura 7, pág. 46).

**Figura 7.** Distribuição geográfica da espécie *Pavonia cancellata*.



**Fonte**: https://www.discoverlife.org/mp/20m?kind=Pavonia+cancellata (Acesso em: 08/12/2025).

Esta espécie se apresenta sob a forma de ervas, é encontrada em áreas cultiváveis, pastagens, margens de rodovias e terrenos baldios. Possui diversas potencialidades para

o uso no paisagismo e na apicultura. Quanto à morfologia *da P. cancellata*, pode-se evidenciar um caule prostrado, cilíndrico, revestido de pêlos brancos. Suas folhas são alternadas, com pecíolos pilosos e providas de um par de estípulas lineares. As flores são isoladas nas extremidades das folhas, com longo pedúnculo; seu cálice possui 5 sépalas soldadas e sua corola é amarelada com 5 pétalas soldadas, formando um pequeno tubo com interior avermelhado. Seu androceu é constituído por estames soldados através de filetes que formam uma coluna e o gineceu apresenta o estigma mais alto que a coluna de estames. Seu fruto seco é do tipo esquizocarpo, com 5 mericarpos. A propagação da espécie se dá por meio de sementes e pode ser diferenciada das demais espécies do gênero pelo aspecto das suas folhas sagitadas (MOREIRA, 2011) (Figura 8, pág. 47).

**Figura 8.** Caracterização botânica da espécie *Pavonia cancellata*.



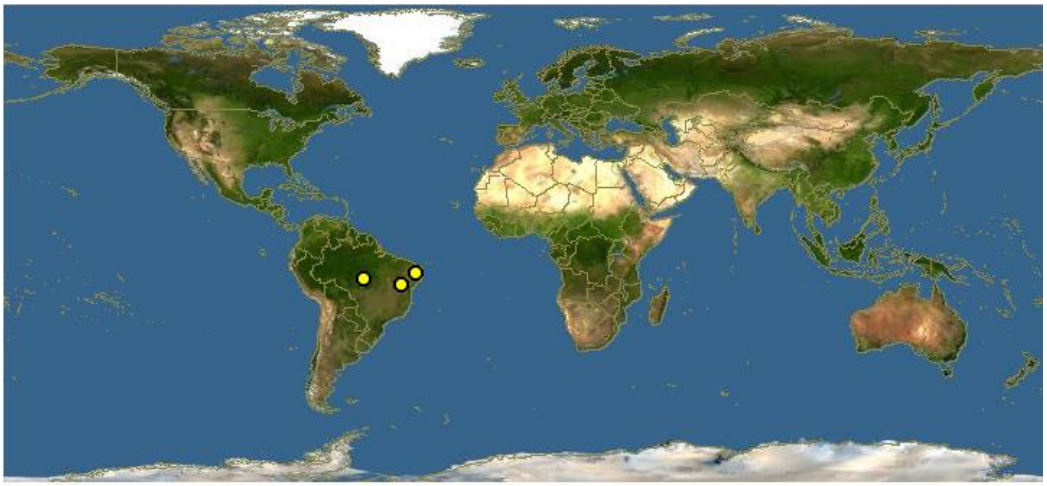

**Fonte**: https://plantidtools.fieldmuseum.org/pt/nlp/catalogue/3684215 Acesso em: 08/12/2025).

Estudo fitoquímico realizado com as partes aéreas desta espécie levou ao isolamento e caracterização estrutural dos seus primeiros metabólitos secundários, sendo eles: uma mistura de esteroides (*β*-sitosterol e estigmasterol), uma mistura de esteroides glicosilados (*β*-sitosterol e estigmasterol glicosilados) e dois flavonoides (canferol-3-*O*-*β*-D-(6’’*E*-*p*-coumaroil) glicopiranosídeo e 5,4’-dihidroxi-3,7-dimetoxiflavona) (CASEMIRO-JÚNIOR et al., 2013; DIAS et al., 2017; RAMIRES et al., 2010).

### 3.5 Considerações sobre a espécie *Pavonia blanchetiana* Miq.

A espécie *Pavonia blanchetiana* Miq. é popularmente conhecida como algodão bravo, apresenta-se como subarbusto ou como arbusto atingindo de 1 a 3m de altura e se distribui predominantemente na região Nordeste do Brasil, desde o estado de Pernambuco até a Bahia, sendo encontrada em campos rupestres, encostas de morros rochosos, caatinga e beira de estradas (ESTEVES, 2015) (Figura 9, pág. 48).

**Figura 9.** Distribuição geográfica da espécie *Pavonia blanchetiana*.



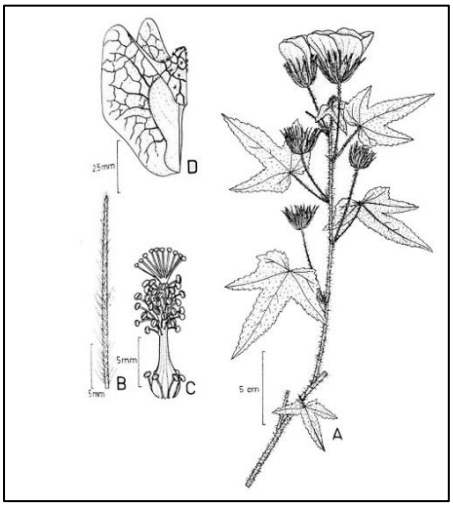
**Fonte**: https://www.discoverlife.org/mp/20m?kind=Pavonia+blanchetiana (Acesso em: 08/12/2025).

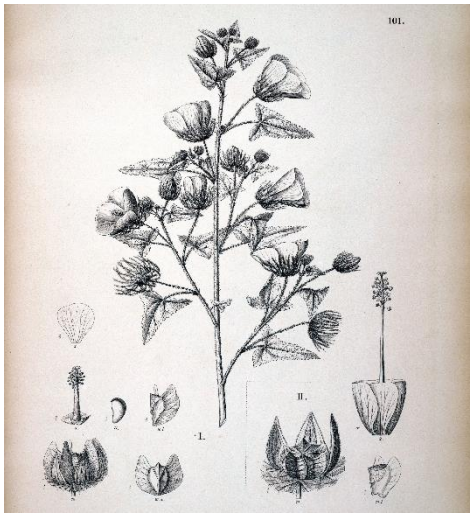
Sua morfologia apresenta folhas inteiras a trilobadas, com base que varia de cordada a hastada e margem serreada. Contém estípulas eretas, lineares e atenuadas. Suas inflorescências geralmente são unifloras com flores vistosas, bractéolas livres, cálice cupuliforme, externamente, possui tricomas estrelados, pétalas obovadas e róseas; e tubo estaminal ereto (LIMA & CONCEIÇÃO, 2016).

*Pavonia blanchetiana* é geralmente confundida com *Pavonia cancellata* devido à morfologia do epicálice constituído por mais de 10 bractéolas lineares e longamente ciliadas na margem. Contudo, essa espécie apresenta o hábito ereto, pétalas róseas e o tubo estaminal comparativamente maior, além de folhas e mericarpos morfologicamente distintos, enquanto *P. cancellata* apresenta o hábito prostrado e pétalas amarelas (FLORA DO BRASIL, 2020) (Figura 10, pág. 49).

Não existe nenhum estudo fitoquímico com esta espécie evidenciado na literatura, o que permite, assim, buscar o conhecimento sobre os seus primeiros metabólitos secundários.

**Figura 10.** Caracterização botânica da espécie *Pavonia blanchetiana*.




A: Hábito
B: Bractéola do epicálice, face dorsal
C: Tubo estaminal, estiletes e estigmas
D: Mericarpo



**Fonte:**https://floradobrasil.jbrj.gov.br/reflora/listaBrasil/FichaPublicaTaxonUC/FichaPublicaTaxonUC.do?id=FB9122 (Acesso em: 08/12/2025).

### 3.6 Aspectos gerais sobre *Aedes aegypti* L.

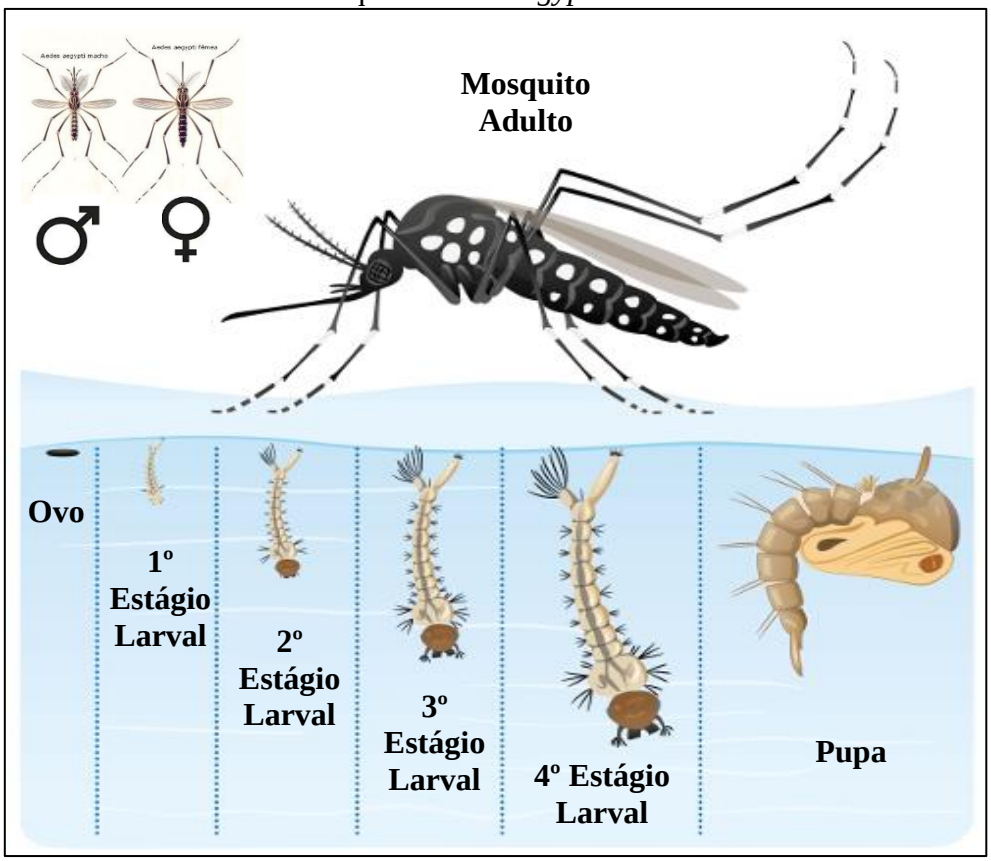
#### 3.6.1 Ciclo de vida e arboviroses transmitidas pelo *Aedes aegypti* L.

O mosquito *Aedes aegypti* L. (Diptera) pertence à família Culicidae está presente em diversos países tropicais e subtropicais, conseguindo se adaptar bem às condições climáticas dessas regiões, tornando-se um dos vetores de vírus altamente patogênicos para humanos, como dengue (DENV), chikungunya (CHIKV), Zika (ZIKV) e febre amarela (FA), que causam doenças febris, hemorrágicas e neurológicas e continuam sendo uma grande ameaça à saúde pública global (GÓMEZ et al., 2022).

O ciclo de vida do *Aedes aegypti* baseia-se principalmente na oviposição da fêmea do mosquito em recipientes com água parada. Este ciclo de vida se divide em aquático e terrestre, compreendendo as fases de ovo, larva, pupa e adulto. Os ovos em contato com a água eclodem em cerca de 2 a 3 dias, transformando-se em larvas, que passam por quatro estágios de desenvolvimento (L1, L2, L3 e L4) com duração de 5 a 7 dias, quando se transformam em pupas. O estágio de pupa é o último estágio aquático e tem duração

de 2 a 3 dias, quando finalmente se transforma em mosquito adulto. Todo o ciclo do *Ae. aegypti* pode variar conforme a disponibilidade de alimentos, quantidade de larvas, temperatura, umidade e/ou presença de outros organismos, levando assim um período total de 8 a 10 dias (SANTANA & LIMA, 2021) (Figura 11, pág. 50).

**Figura 11.** Ciclo de vida do mosquito *Aedes aegypti* L.

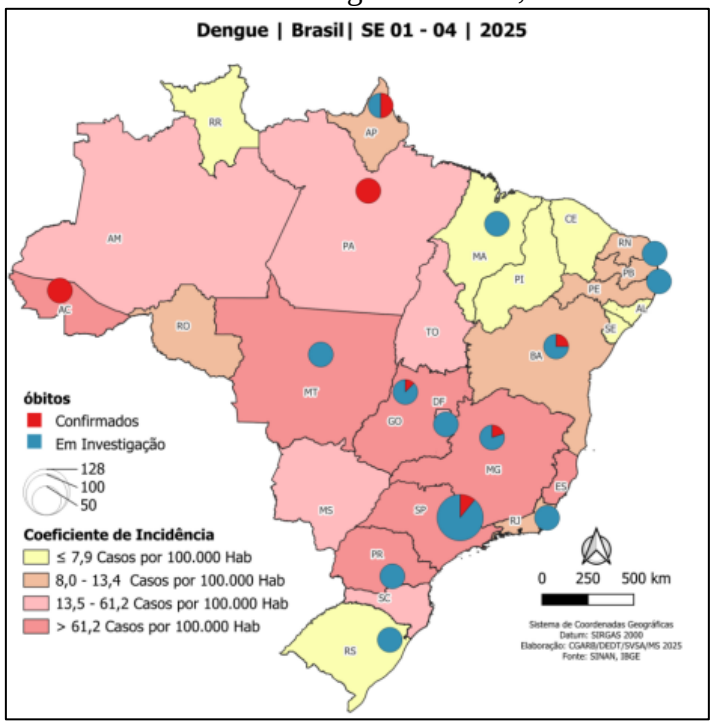



**Fonte**: Adaptado de LOPES, 2022.

A incidência de dengue aumentou drasticamente nas últimas décadas, em 2024, mais de 7,6 milhões de casos notificados ao redor do mundo, dos quais 3,4 milhões foram confirmados, havendo mais de 16 mil casos graves e mais de 3.000 mortes relatadas. Dados epidemiológicos mostraram que o Brasil concentrou a maioria dos casos globais, estimando-se que o país tenha registrado aproximadamente 6,3 milhões de casos suspeitos no mesmo ano (WORLD HEALTH ORGANIZATION, 2024).

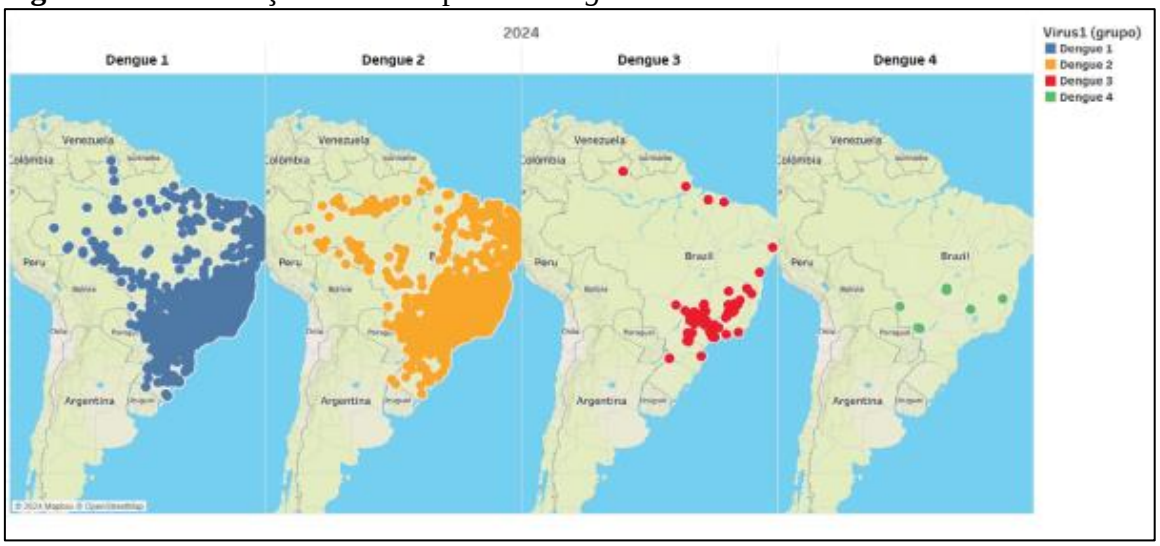
Em 2025, conforme relatório do Ministério da Saúde, foram notificados mais de 1.660.190 casos prováveis de dengue no país, sendo confirmados mais de 1.762 óbitos, entre casos de dengue e dengue hemorrágica, com 200 óbitos ainda em fase de investigação (HERRIMAN, 2025) (Figura 12, pág. 51).

**Figura 12.** Incidências de casos de Dengue no Brasil, 2025.




**Fonte**: Brasil, 2025.

**Figura 13.** Distribuição dos sorotipos de *Dengue vírus* no Brasil – 2024.




**Fonte**: Brasil, 2024.

A dengue é uma doença infecciosa aguda, febril e de etiologia viral, transmitida principalmente pelo *Aedes aegypti*. O vírus da dengue apresenta quatro sorotipos antigenicamente distintos: DENV-1, DENV-2, DENV-3 e DENV-4 (Figura 13, pág. 51) que, embora compartilhem aproximadamente 65% da identidade genômica, possuem diferenças moleculares significativas nas proteínas estruturais e não estruturais, especialmente na proteína E de envelope, responsável pela ligação a receptores celulares

e pelo desencadeamento da resposta imune. Essas variações na sequência e conformação da proteína E, em particular no Domínio III, determinam tanto a especificidade imunológica de cada sorotipo quanto o padrão de neutralização pelos anticorpos (SINHA et al., 2024).

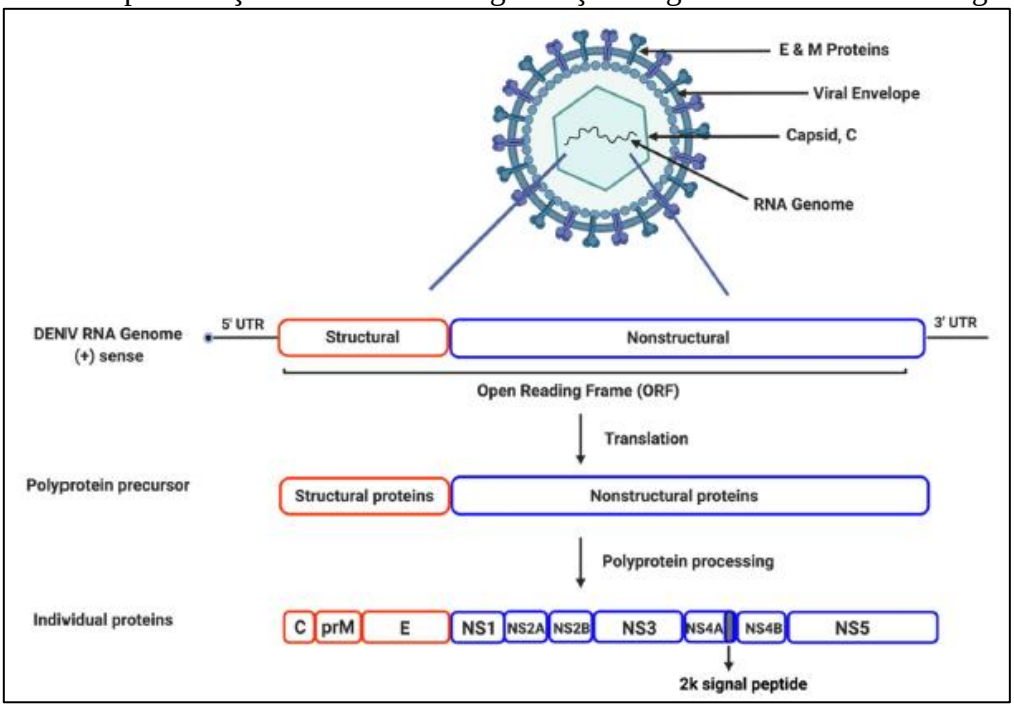
Do ponto de vista clínico, essas diferenças moleculares influenciam a forma como o sistema imunológico reconhece cada sorotipo. A infecção primária por um sorotipo gera imunidade duradoura apenas contra ele, mas induz anticorpos que pode se ligar aos demais sorotipos, favorecendo o fenômeno de potencialização dependente de anticorpos. Esse mecanismo está diretamente relacionado ao risco aumentado de evolução para formas graves da doença, incluindo dengue hemorrágica e síndrome do choque da dengue, durante infecções secundárias por sorotipos diferentes (BHATT et al., 2021).

Assim, a diversidade molecular entre DENV-1, DENV-2, DENV-3 e DENV-4 não apenas define sua identidade biológica, mas também condiciona a variabilidade clínica observada na população infectada. Devido ao seu amplo espectro clínico, ainda há dificuldades para diagnosticar a doença (GABRIEL et al., 2018).

O desenvolvimento contínuo de vacinas contra a dengue tem sido um foco importante da pesquisa científica, com múltiplos candidatos em diferentes fases de estudo clínico. Atualmente, uma série de vacinas experimentais encontra-se em estudo, incluindo vacinas de DNA, RNA mensageiro, recombinantes e baseadas em vírus quiméricos, com o objetivo de oferecer proteção mais ampla e duradoura (SINHA et al., 2024).

A Dengvaxia®, desenvolvida pela Sanofi Pasteur, representa a primeira vacina licenciada contra dengue desde 2015 e apresenta uma eficácia vacinal geral de aproximadamente 60%. Trata-se de uma vacina tetravalente baseada em um vírus quimérico, no qual foram inseridos os genes *prM* e *E* dos quatro sorotipos do vírus da dengue. Seu uso foi permitido e aprovado em diversos países para indivíduos entre 9 e 16 anos, porém apresenta riscos significativos de dengue grave, principalmente em crianças menores de 9 anos sem histórico prévio de infecção (OBI et al., 2021) (Figura 14, pág. 53).

**Figura 14.** Representação da estrutura e organização do genoma do vírus da dengue.




**Fonte**: OBI et al., 2021.

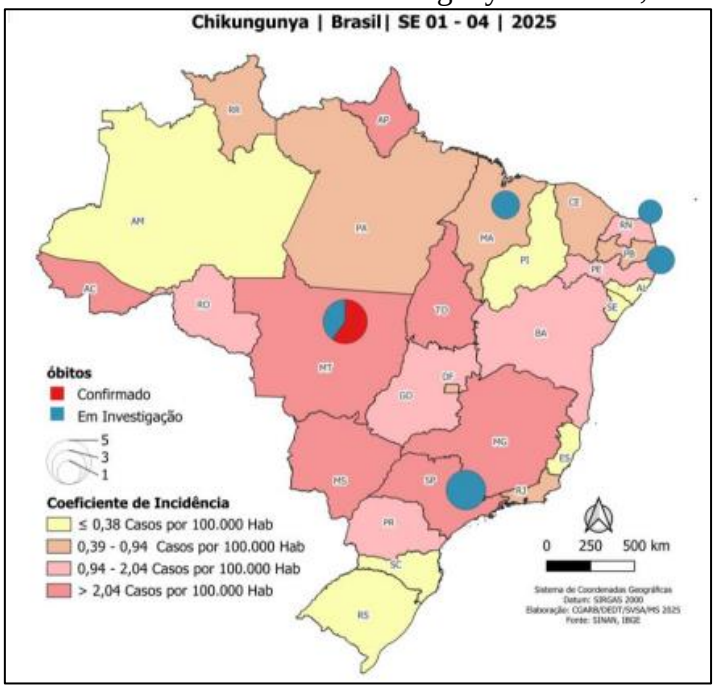
Embora represente um grande avanço na ciência, a Dengvaxia apresentou algumas limitações significativas em ensaios clínicos, como uma eficácia moderada, especialmente em indivíduos soronegativos, ou seja, aqueles que nunca foram infectados por dengue, e um risco de doença grave após infecção subsequente devido à potencialização dependente de anticorpos. Diante desse histórico e progressos, ainda há muitos desafios significativos para o desenvolvimento de uma vacina de dengue segura, duradoura e eficaz contra os quatro sorotipos em toda a população (SILVA & SESMA, 2023).

Recentemente, a vacina QDENGA® foi aprovada, com eficácia geral de cerca de 80% após 12 meses, embora não tenha demonstrado proteção contra o sorotipo DENV-3 em indivíduos soronegativos. No Brasil, essa vacina foi incorporada ao Sistema Único de Saúde (SUS), com distribuição gratuita coordenada pelo Ministério da Saúde, representando um avanço significativo nas estratégias de prevenção da dengue. Adicionalmente, a vacina Butantan-DV, desenvolvida pelo Instituto Butantan, avançou no processo de implementação, com a aquisição de milhões de doses pelo Ministério da Saúde e início de sua distribuição no SUS. Por ser uma vacina de dose única e de produção nacional, a Butantan-DV configura-se como uma promissora alternativa para ampliar a cobertura vacinal e fortalecer o controle da doença no país (NOGUEIRA et al., 2024; BRASIL, 2025).

As fêmeas dos mosquitos *Aedes aegypti* transmitem outra doença, a Chikungunya (CHIKV), que se trata de uma doença sintomática, onde são referidas febre e dores intensas com frequente poliartralgia debilitante, podendo persistir por até meses ou anos em fases crônicas da doença. O vírus da Chikungunya tem sido responsável por surtos e epidemias nos continentes asiático e africano por volta de 2004, onde foram relatados mais de 244 mil casos e 203 mortes (SILVA et al., 2018).

Em 2025, a Organização Mundial da Saúde (OMS) reportou um ressurgimento considerável da infecção pelo vírus Chikungunya (CHIKV) em diversos países, incluindo regiões que não registravam casos significativos de casos nos últimos anos. No período compreendido entre 1º de janeiro a 30 de setembro de 2025, foram notificados globalmente 445.271 casos suspeitos e confirmados de CHIKV, resultando em 155 óbitos distribuídos por 40 países (WORLD HEALTH ORGANIZATION, 2024). No Brasil, até o mês de abril de 2025 foram notificados 44.249 casos prováveis de chikungunya, correspondendo a incidência de 21,8 casos/100 mil habitantes (BRASIL, 2025) (Figura 15, pág. 54).

**Figura 15.** Incidências de casos de Chikungunya no Brasil, 2025.




**Fonte**: Brasil, 2024.

Outro vírus transmitido pela fêmea do *Aedes aegypti* é o vírus Zika (ZIKV), um arbovírus emergente que também representa uma importante preocupação para a saúde pública no país. Os sintomas da infecção pelo Zika costumam surgir entre três e doze dias

após a picada do mosquito infectado, período correspondente à incubação do vírus. Geralmente, são manifestações leves que persistem por dois a sete dias, e cerca de 80% dos indivíduos podem permanecer assintomáticos (BRASIL, 2026). Porém a sintomatologia da infecção ainda é semelhante à de outras arboviroses, especialmente à dengue, podendo incluir febre intermitente, letargia, exantema maculopapular pruriginoso, hiperemia conjuntival sem prurido, além de artralgia, mialgia e cefaleia (CAMPOS et al., 2021).

Segundo estudos epidemiológicos, o ZIKV apresenta semelhanças estruturais com outros arbovírus, como a dengue e a febre amarela. Diversos trabalhos relataram a forte relação entre a infecção por ZIKV durante a gestação e o risco de microcefalia e outras manifestações da Síndrome Congênita do Zika, caracterizadas por alterações cerebrais, distúrbios motores e atraso no desenvolvimento, além de encefalopatias, febre hemorrágica, e até óbito (OLIVEIRA & VASCONCELOS, 2016; RASMUSSEN et al., 2016).

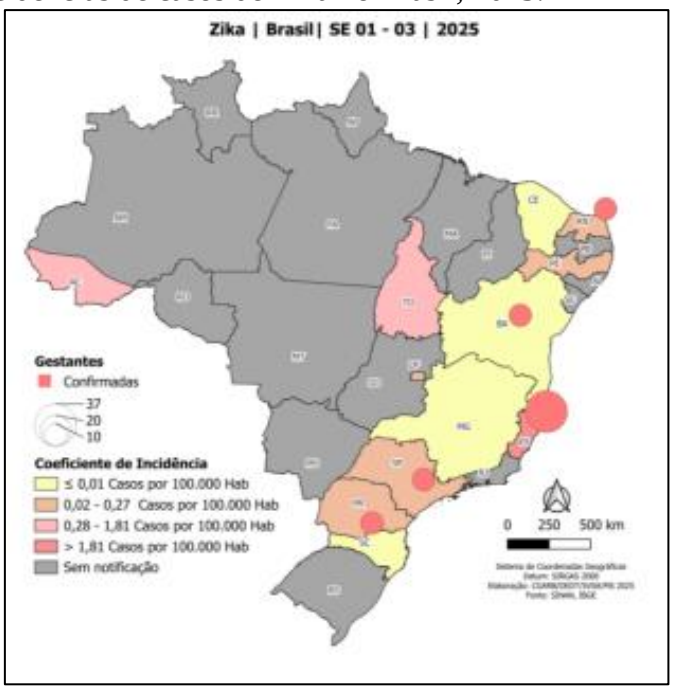
Estudos clínicos indicaram a associação entre ZIKV e a síndrome de Guillain-Barré em adultos, evidenciando seu potencial neurotrópico (CAO-LORMEAU et al., 2016). Pesquisas ainda descrevem a capacidade do vírus de ser transmitido não apenas pelo vetor, mas também por via sexual, vertical (da gestante para o feto) e, raramente, por transfusão sanguínea. Do ponto de vista imunológico, investigações mostram que o vírus possui mecanismos que modulam a resposta antiviral do hospedeiro, facilitando sua replicação em células neurais e placentárias. A diversidade genética do ZIKV, especialmente entre as linhagens africanas e asiáticas, tem sido discutida quanto ao impacto na virulência e na severidade das manifestações clínicas (MEAD; HILLS; BROOKS, 2018).

O Brasil foi o primeiro país do continente americano a detectar circulação do Zika em meados de abril de 2015, ocorrendo um maior pico de casos no ano de 2016, com 273.904 casos notificados, dos quais 128.793 foram confirmados laboratorialmente. Em 2023, foram relatados 54.116 casos, dos quais 6.201 foram comprovados. Quanto às consequências, entre novembro de 2015 e outubro de 2019, foram notificados 18.282 casos suspeitos de microcefalia associada ao ZIKV, com um pico de notificações em 2016, com 8.610 casos, em que a região mais acometida teria sido a Região Nordeste (CAMPOS et al., 2021; RABE et al., 2025) (Figura 16, pág. 56).

Assim como o vírus Zika, outras arboviroses permanecem relevantes no cenário epidemiológico brasileiro, entre elas, a febre amarela. Esta doença é imunoprevenível que

pode evoluir para quadros clínicos graves, com letalidade de até 50%. A transmissão ocorre tanto em ambiente urbano, por meio do *Aedes aegypti*, quanto em áreas silvestres, pelos mosquitos dos gêneros *Haemagogus* e *Sabethes* (GAVA et al., 2022).

**Figura 16.** Incidências de casos de Zika no Brasil, 2025.




**Fonte**: Brasil, 2024.

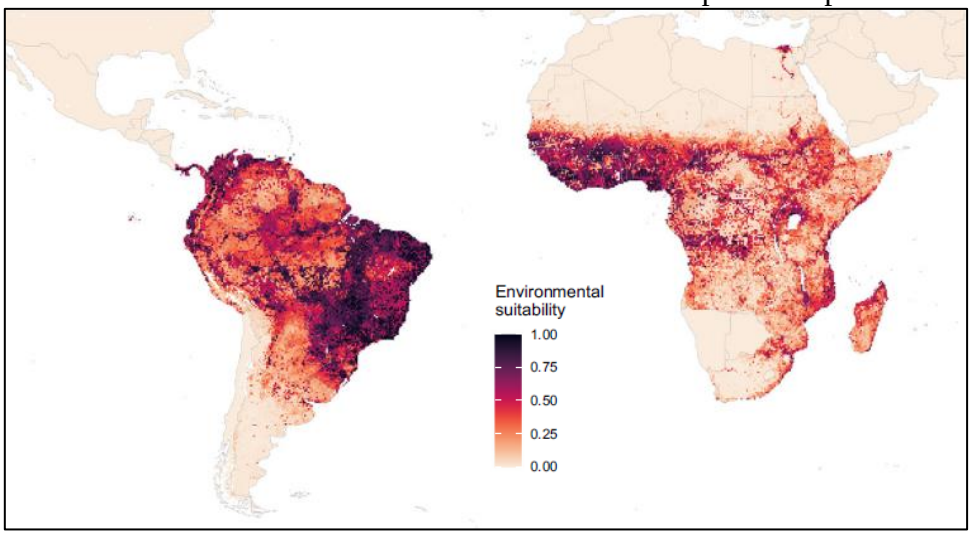
Diferentemente do ZIKV, a febre amarela conta, entretanto, com vacina eficaz à base de vírus vivo atenuado, indicada para indivíduos que residem ou circulam em regiões com risco de transmissão, desempenhando papel central no controle e na prevenção da doença (NORONHA & CAMACHO, 2018).

O risco global ainda continua elevado referente à febre amarela, afetando dezenas de países na África e nas Américas com estimativas que apontam entre 67.000 e 173.000 infecções graves por ano e entre 31.000 e 82.000 mortes anuais nessas regiões. Em 2025, a OMS alertou para um aumento expressivo de casos em toda a América, onde até maio deste ano, foram relatados 221 casos confirmados na região, resultando em 89 mortes (WORLD HEALTH ORGANIZATION, 2024) (Figura 17, pág. 57).

Segundo relatório do Ministério da Saúde, até março de 2025 foram confirmados 81 casos de febre amarela, com 31 óbitos. Todos os envolvidos tiveram histórico de exposição em áreas silvestres e/ou florestais, devido à atividades laborais ou recreativas. Ainda neste mesmo período, foram notificados 442 casos envolvendo primatas não humanos, sendo 47 destes confirmados laboratorialmente (ORGANIZAÇÃO PAN-

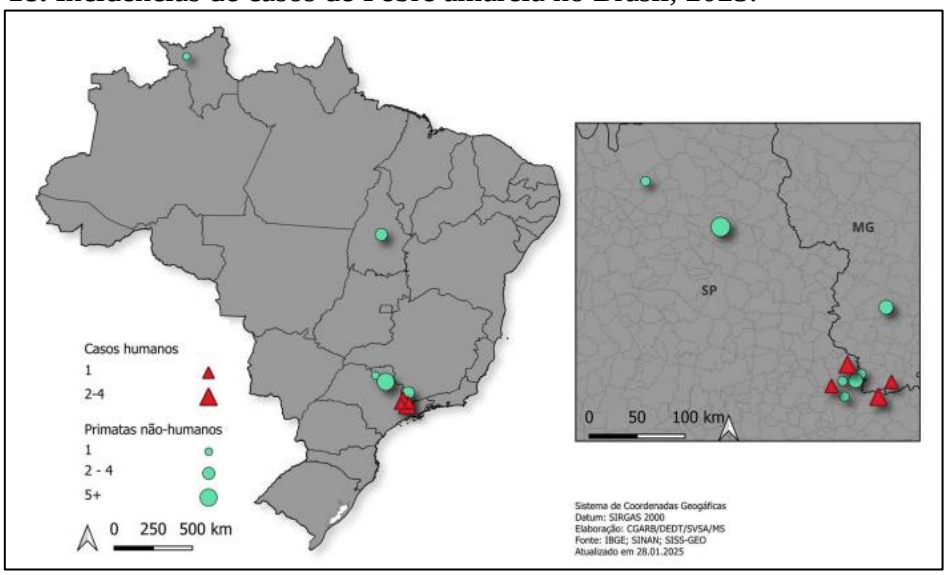
AMERICANA DA SAÚDE, 2025) (Figura 18, pág. 57).

**Figura 17.** Incidência de casos de febre amarela em áreas tropicais do planeta.




**Fonte**: LIM et al., 2025.

**Figura 18.** Incidências de casos de Febre amarela no Brasil, 2025.




**Fonte**: Brasil, 2024.

A febre amarela apresenta uma ampla gama de manifestações clínicas, que podem variar de formas leves a quadros graves com risco de morte. Nos casos leves, os sintomas iniciais incluem febre alta, calafrios, dor de cabeça intensa, mal-estar geral, fadiga, dores musculares, náuseas e vômitos, geralmente desaparecendo após dois a quatro dias. Entretanto, cerca de 15% dos infectados evoluem para a fase grave da doença, caracterizada pelo retorno da febre, icterícia, urina escura, dores abdominais, vômitos com presença de sangue e hemorragias em diferentes órgãos. Nessa fase, podem ocorrer insuficiência hepática e renal, choque, falência de múltiplos órgãos e, em muitos casos,

óbito em até 10 dias após o início da infecção. É importante destacar que algumas pessoas infectadas podem permanecer assintomáticas, o que dificulta a detecção precoce e a vigilância epidemiológica da doença (ORGANIZAÇÃO PAN-AMERICANA DA SAÚDE, 2025).

Fatores socioambientais, como o processo de urbanização desordenada, a insuficiência da infraestrutura urbana, o acúmulo de resíduos sólidos e determinados hábitos da população, favorecem a proliferação do *Aedes aegypti* e, consequentemente, a disseminação de arboviroses como dengue, Zika, chikungunya e febre amarela. Além desses aspectos, fatores climáticos desempenham papel fundamental nesse contexto: a elevação da temperatura ambiental acelera o ciclo de desenvolvimento e reprodução do vetor, enquanto os períodos chuvosos contribuem para o acúmulo de água em recipientes e ambientes urbanos, criando condições ideais para a oviposição e o desenvolvimento das larvas, o que intensifica a transmissão viral. Na ausência de vacinas eficazes para a maioria dessas doenças, a principal estratégia de controle continua sendo a interrupção do ciclo de transmissão dos vírus, por meio da eliminação de criadouros de mosquitos e do uso de medidas preventivas, como telas, repelentes e campanhas educativas. Essa abordagem requer não apenas ações efetivas dos órgãos públicos de saúde, mas também a participação ativa da população, que deve adotar práticas de higiene e manejo ambiental em residências e áreas comunitárias (SOUZA et al., 2011; MUKANDIWA et al., 2016).

Além disso, programas de vigilância entomológica e de controle integrado de vetores têm se mostrado essenciais para reduzir a densidade de mosquitos e minimizar o risco de surtos.

### 3.6.2 Principais formas de combate do vetor

Diversas estratégias são empregadas no Brasil para o controle do *Aedes aegypti*, envolvendo medidas mecânicas, químicas e biológicas, complementadas por ações educativas voltadas à população. Segundo o Ministério da Saúde, os Agentes Comunitários desempenham papel central na orientação das comunidades, promovendo práticas que visam eliminar criadouros e, consequentemente, interromper a transmissão dessas arboviroses (ZARA et al., 2016).

O controle do vetor pode ser dividido em três modalidades principais: mecânico, biológico e químico. O controle mecânico consiste na remoção de criadouros, na drenagem de reservatórios e na instalação de telas em portas e janelas, prevenindo a

reprodução dos mosquitos. O controle biológico de *Aedes aegypti* envolve o uso de organismos predadores, como peixes e copépodes, bem como de patógenos e parasitas naturais. Estratégias alternativas incluem espécies de larvas predadoras, como as de *Toxorhynchites* spp., e plantas carnívoras do gênero *Utricularia*, que podem capturar larvas em pequenos criadouros aquáticos (BOLTON, 2024). Complementarmente, diversas plantas com ação larvicida e inseticida também têm sido avaliadas, oferecendo substâncias naturais capazes de reduzir ou eliminar populações de *Aedes*. Além disso, ainda existem bactérias entomopatogênicas, como *Bacillus sphaericus* e *Bacillus thuringiensis israelensis*, capazes de produzir toxinas que provocam mortalidade larval (ARAÚJO et al., 2007).

O controle químico consiste na aplicação de inseticidas direcionados tanto às populações adultas (*adulticidas*) quanto às larvais (*larvicidas*); entretanto, o uso indiscriminado dessas substâncias pode favorecer o desenvolvimento de resistência e causar impactos ambientais significativos (FERNANDES et al., 2018). Essas abordagens devem representar métodos sustentáveis e ambientalmente seguros, complementares ao controle químico, para a diminuição da transmissão de arboviroses (Figura 19, pág. 59).

**Figura 19.** Controle do vetor (Mecânico (A), Químico (B,C) e Biológico (D,E,F).




**Fontes:** (A) Brasil, 2024; (B) São Vicente, 2025; (C) Guaíra, 2024; (D) Diário do Aço, 2024; (E) Uai, 2025; (F) Bolton, 2024.

Diante dessas limitações, torna-se fundamental a busca por alternativas ambientalmente seguras e eficazes para o combate ao *Ae. aegypti*. Nesse contexto, a prospecção de produtos naturais derivados do metabolismo vegetal surge como uma estratégia promissora. Extratos, fases e compostos isolados de plantas possuem potencial larvicida e podem representar soluções ecológicas, economicamente viáveis e biodegradáveis, capazes de substituir ou complementar os inseticidas tradicionais (NUNES et al., 2015; MUKANDIWA et al., 2016).

Diversos estudos demonstraram a eficácia desses produtos *in vitro* e *in silico*, evidenciando seu potencial para o desenvolvimento de novos agentes de controle de mosquitos (FERNANDES et al., 2018; FERREIRA et al., 2019; MARQUES et al., 2022). Assim, a investigação de extratos, fases e substâncias isoladas de origem vegetal representa uma estratégia inovadora e de grande relevância para o controle do *Aedes aegypti*, contribuindo para a prevenção de doenças como dengue, Zika, chikungunya e febre amarela.

# 4. Metodologia

## 4.1 Procedimentos Gerais

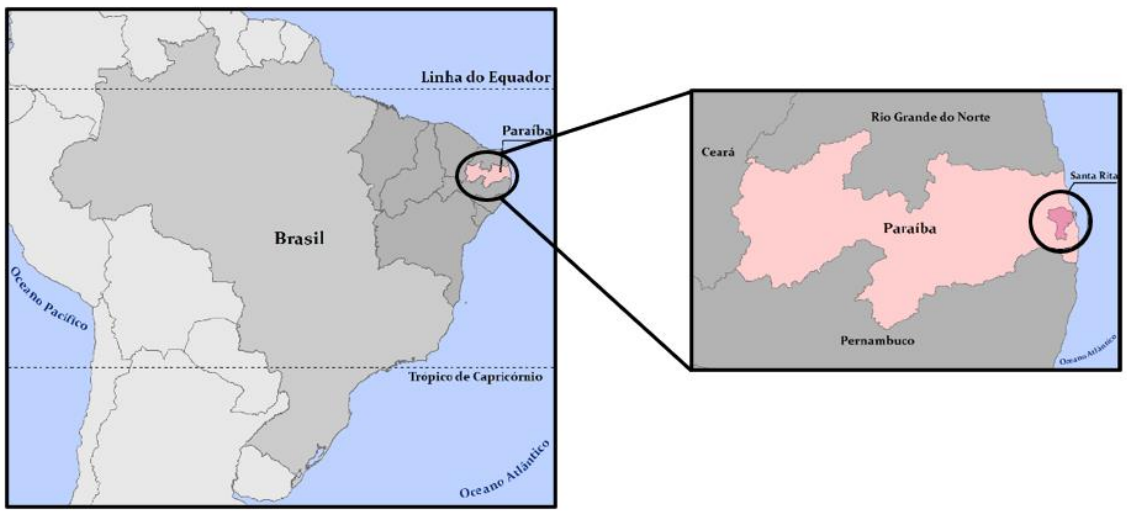
### 4.1.1 Levantamento bibliográfico

O levantamento bibliográfico foi realizado utilizando-se, dos recursos disponíveis como, por exemplo, o portal de periódicos da CAPES, *Google Scholar*, *PubMed*, *Scielo*, *SciFinder*, *Scopus*, além de outras fontes científicas disponibilizadas na Internet.

### 4.1.2 Coleta dos Materiais Botânicos

As partes aéreas de *Pavonia malacophylla* (Link & Otto) Garcke foram coletadas no município de Santa Rita/PB em junho de 2019 (Figura 20, pág. 62). A identificação botânica foi realizada pela Profª. Drª. Maria de Fátima Agra (PgPNSB/CCS/UFPB) e uma exsicata encontram-se depositadas no Herbário Prof. Lauro Pires Xavier (CCEN/UFPB), sob o código Agra et al. 7038.

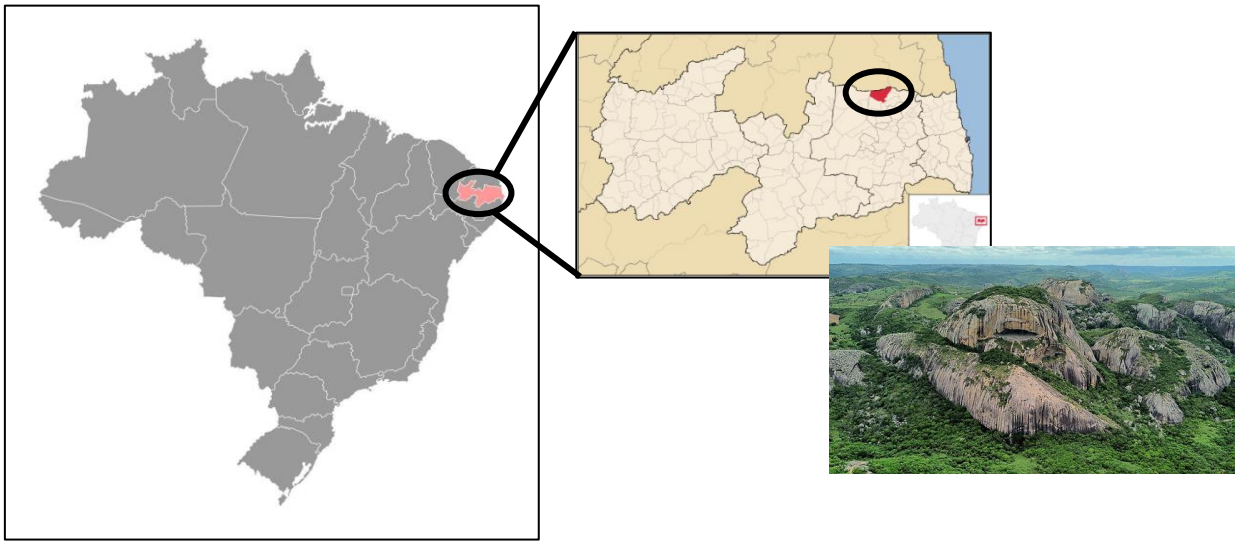
**Figura 20.** Localização da coleta do material botânico de *Pavonia malacophylla*.




**Fonte:** Elaborado pelo autor (2026).

As partes aéreas de *Pavonia cancellata* (L.) foram coletadas no Parque Estadual da Pedra da Boca no município de Araruna/PB em junho de 2020 (Figura 21, pág. 63). A identificação botânica foi realizada pela Profª. Drª. Maria de Fátima Agra (PgPNSB/CCS/UFPB) e uma exsicata depositada no Herbário Prof. Lauro Pires Xavier (Centro de Ciências Exatas e da Natureza-CCEN/UFPB) sob o código Agra et al. 6643.

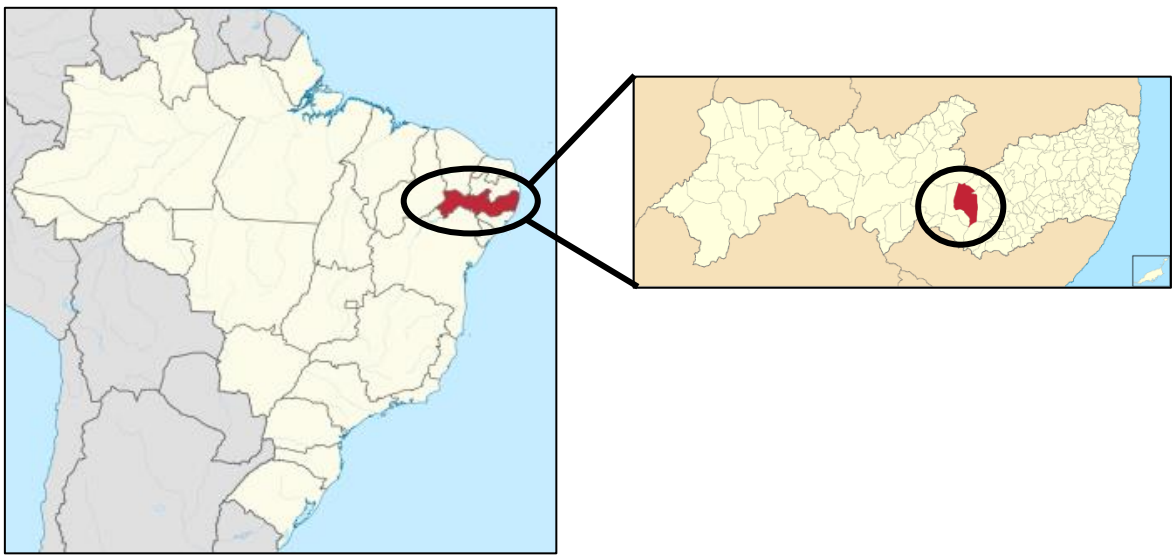
**Figura 21.** Localização da coleta do material botânico de *Pavonia cancellata*.



**Fonte:** Elaborado pelo autor (2026).

As partes aéreas de *Pavonia blanchetiana* (Miq.) foram coletadas no município de Buíque/PE, em novembro de 2022 (Figura 22, pág. 63). A identificação botânica também foi realizada pela Profª. Drª. Maria de Fátima Agra (PgPNSB/CCS/UFPB) e uma exsicata encontra-se depositada no Herbário Prof. Lauro Pires Xavier (Centro de Ciências Exatas e da Natureza-CCEN/UFPB) sob o código Agra et al. 6855.

**Figura 22.** Localização da coleta do material botânico de *Pavonia blanchetiana*.



**Fonte:** Elaborado pelo autor (2026).

Esta pesquisa consta registrada no Sistema Nacional de Gestão do Patrimônio Genético e do Conhecimento Tradicional Associado (SisGen) sob o código A568B8A.

## 4.2 Estudo Fitoquímico

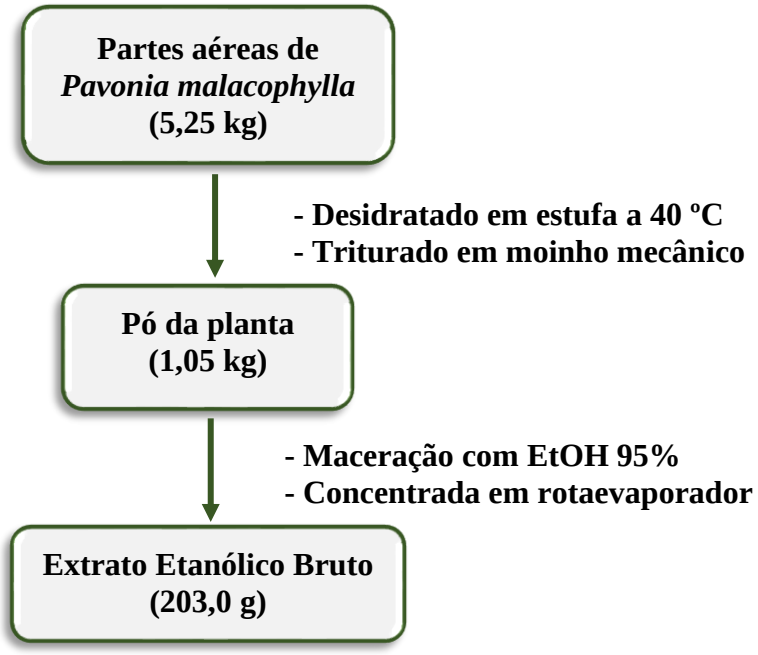
### 4.2.1 Processamento das Plantas

Os materiais botânicos (partes aéreas) de *Pavonia malacophylla* (5,25 kg), *Pavonia cancellata* (14,55 kg) e *Pavonia blanchetiana* (10,55 kg) foram submetidos separadamente à desidratação em estufa com ar circulante e temperatura média de 40 ºC por 72h, sendo em seguida triturados em moinho mecânico, obtendo-se 1,05 kg, 2,91 kg, e 2,11 kg de pós, respectivamente.

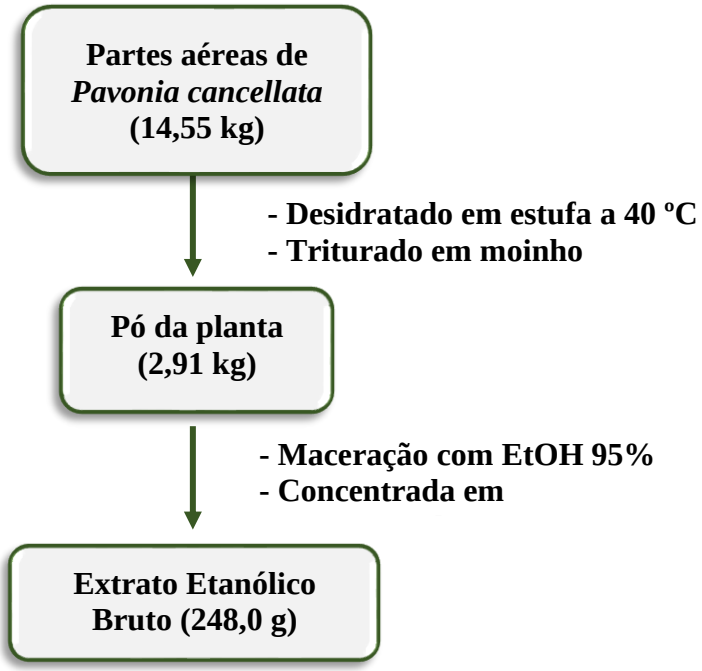
### 4.2.2 Obtenção dos Extratos e seus Particionamentos

Os pós das partes aéreas de *Pavonia malacophylla* (1,05 kg), *Pavonia cancellata* (2,91 kg) e *Pavonia blanchetiana* (2,11 kg) foram macerados separadamente com etanol a 95%, sendo este processo repetido quatro vezes para uma melhor extração dos seus constituintes químicos. Após todo o processo de extração, as soluções extrativas obtidas de cada espécie foram filtradas e concentradas em rotaevaporador sob pressão reduzida a 40 ºC, fornecendo 203,0 g (Esquema 2, pág. 64), 248,0 g (Esquema 3, pág. 65) e 230,0 g de EEB (Esquema 4, pág. 65), respectivamente.

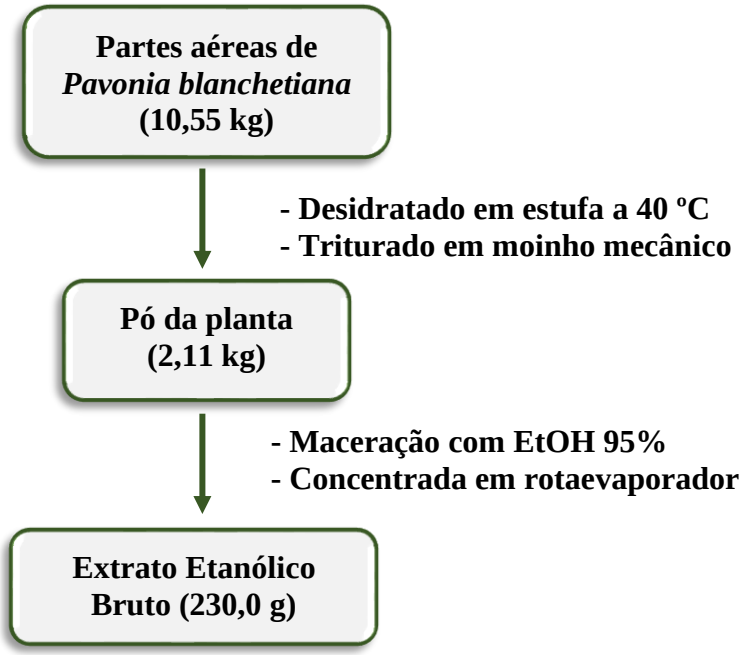
**Esquema 2.** Obtenção do EEB das partes aéreas de *Pavonia malacophylla*.



**Esquema 3.** Obtenção do EEB das partes aéreas de *Pavonia cancellata.*

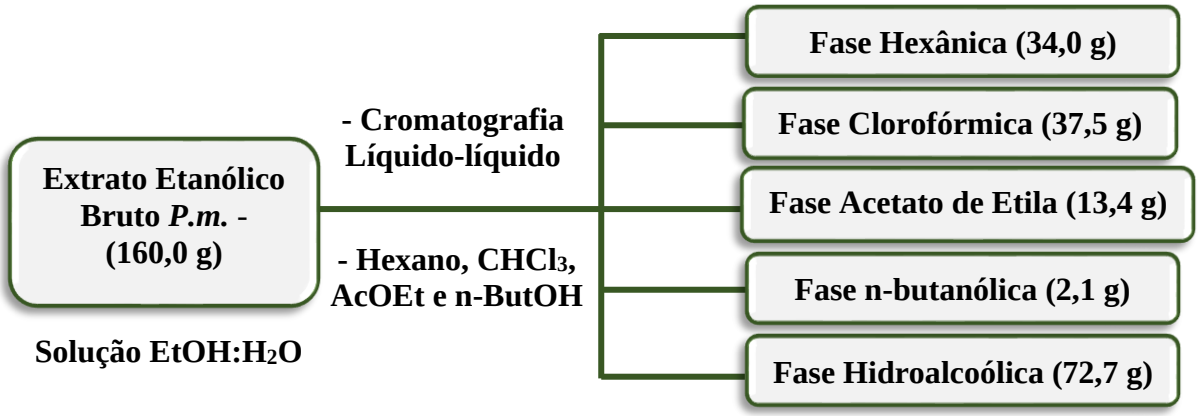



**Esquema 4.** Obtenção do EEB das partes aéreas de *Pavonia blanchetiana.*




O EEB de *Pavonia malacophylla,* 160,0 g, foi solubilizado em uma solução de EtOH:$H_2O$ (7:3) com o auxílio de um agitador mecânico, obtendo-se assim uma solução hidroalcoólica que foi posteriormente submetida a uma cromatografia líquido-líquido utilizando como fase móvel hexano, clorofórmio, acetato de etila e n-butanol. As soluções resultantes foram concentradas sob pressão reduzida a uma temperatura média de 40 °C (Esquema 5, pág. 66), obtendo-se suas respectivas fases.

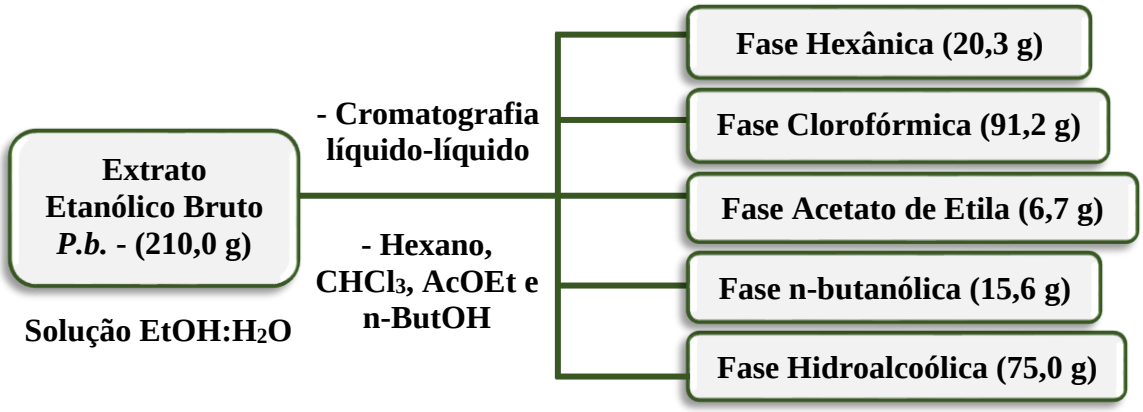
**Esquema 5.** Cromatografia líquido-líquido do EEB de *Pavonia malacophylla.*



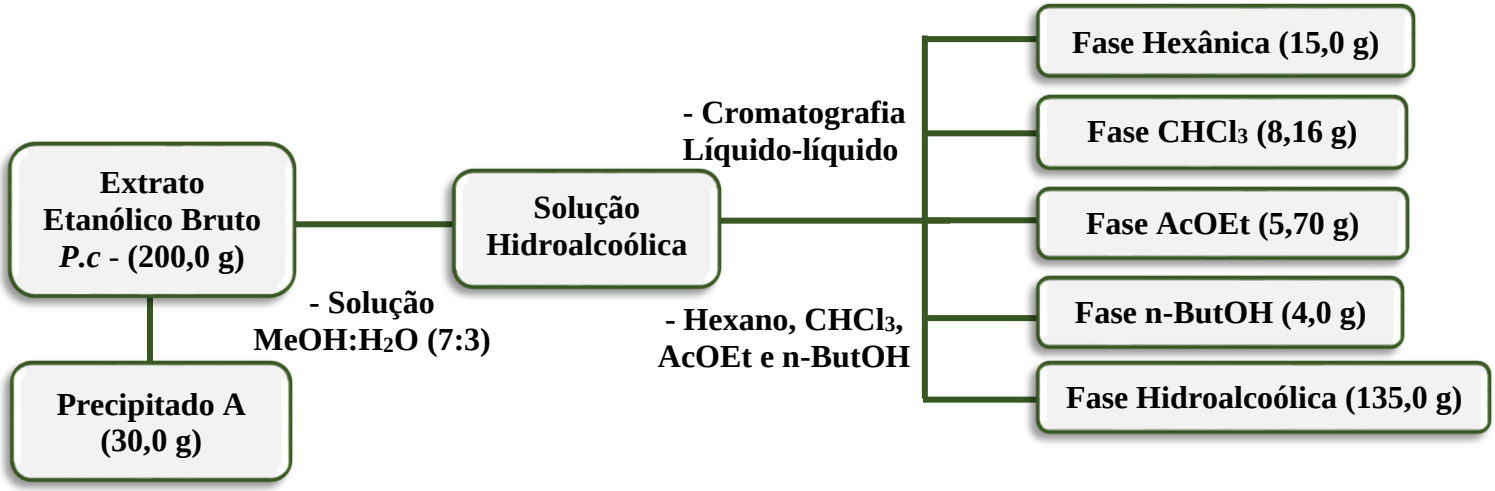

Para o estudo do EEB das partes aéreas de *Pavonia blanchetiana* adotou-se a mesma metodologia empregada para *P. malacophylla* (Esquema 6, pág. 66).

Uma alíquota de 200,0 g do extrato de *Pavonia cancellata* foi solubilizada em MeOH:$H_2O$ (7:3) obtendo-se a solução hidroalcoólica, e uma parte não solúvel que foi denominada precipitado A (PPT A - 30,0 g). A solução foi submetida a cromatografia líquido-líquido, seguindo a metodologia exposta no Esquema 7, pág. 66.

**Esquema 6.** Cromatografia líquido-líquido do EEB de *Pavonia blanchetiana.*




**Esquema 7.** Cromatografia líquido-líquido do EEB de *Pavonia cancellata.*



### 4.2.3 Procedimentos cromatográficos

Para o isolamento dos constituintes químicos das espécies *P. malacophylla*, *P. cancellata e P. blanchetiana* foram adotados métodos cromatográficos, desde Cromatografias em Coluna (CC) com sílica gel 60 (Merck), sílica flash, Sephadex LH-20 (Merck) e/ou C-18 como fases estacionárias e Cromatografia Líquida de Alta Eficiência (CLAE) utilizando um cromatógrafo analítico da marca Shimadzu, equipado com uma coluna de fase reversa C-18 da marca Kromasil, bomba LC-20AT, injetor automático SIL-20A HT e detector UV-VIS SPD-M20A, como fase móvel foram utilizados água ultrapura acidificada (0,1% de ácido fórmico) e metanol grau HPLC (Merk) e um cromatógrafo preparativo da marca Shimadzu, equipado com uma coluna de fase reversa C-18 da marca ACE, bombas LC-6AD, injetor manual, e detector UV-VIS SPD-M10A.

Solventes comerciais P.A. foram utilizados como fases móveis para as cromatografias em colunas, visto que as fases móveis água ultrapura (Milli-Q) acidificada (0,1% de ácido fórmico) e metanol grau HPLC (Merk) foram utilizados na CLAE. Cromatografia em Camada Delgada Analítica (CCDA) foi empregada para a análise e reunião das frações obtidas das cromatografias em coluna.

As substâncias isoladas foram evidenciadas em placas cromatográficas sob radiação ultravioleta nos comprimentos de onda de 254 e 360 nm e reveladas por meio da impregnação das placas em cubas de vidro saturadas com vapores de iodo e reveladores como NP (difenilboriloxietilamina), vanilina e anisaldeído.

### 4.2.4 Caracterização estrutural das substâncias isoladas

A identificação e/ou elucidação estrutural das substâncias isoladas foram realizadas através de métodos espectroscópicos de Ressonância Magnética Nuclear de Hidrogênio e Carbono-13 (RMN $^{1}H$ e RMN $^{13}C$, respectivamente), técnicas bidimensionais (HSQC e HMBC), técnicas hifenadas como CLAE acoplada à a Espectrometria de Massas, além de comparações com modelos da literatura.

### 4.2.5 Processamento cromatográfico da fase $CHCl_3$ do extrato etanólico bruto das partes aéreas de *Pavonia malacophylla*

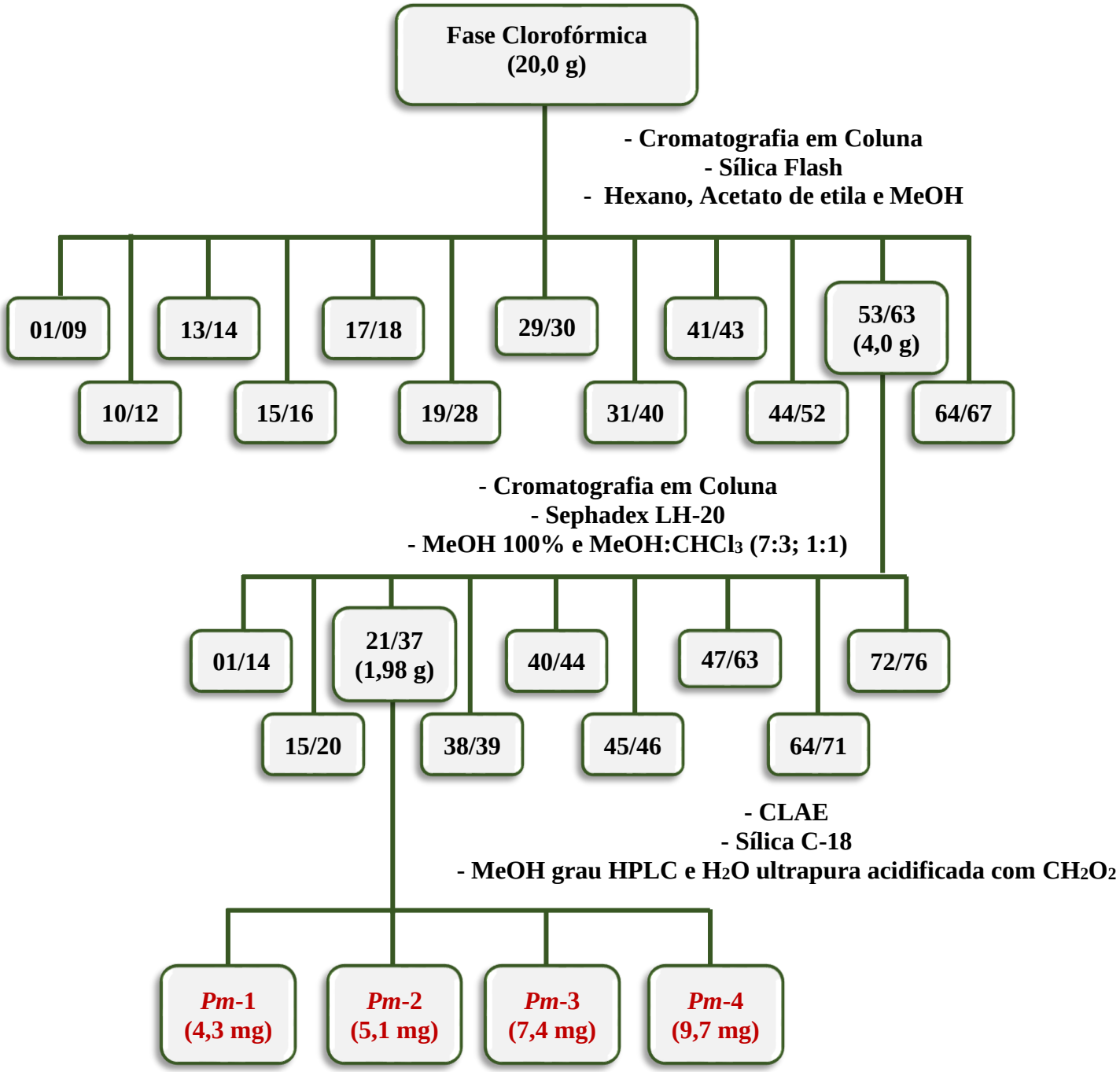
Uma alíquota de 20,0 g da fase clorofórmica do EEB das partes aéreas de *Pavonia malacophylla* foi submetida a uma cromatografia em coluna utilizando como fase estacionária a sílica flash e como fases móveis hexano, acetato de etila, metanol e água ultrapura sozinhos ou em misturas binárias em grau crescente de polaridade, obtendo-se 67 frações de 100 mL cada, que foram concentradas em rotaevaporador e reunidas através de análise em cromatografia em camada delgada analítica (CCDA) segundo as suas semelhanças do perfil cromatográfico e seus fatores de retenção (Rfs), resultando em 12 grupos (Esquema 8, pág. 69; Quadro 2, pág. 69).

A fração 53/63 (4,0 g) foi submetida a uma cromatografia em coluna utilizando como fase estacionária Sephadex LH-20 e fases móveis de metanol e clorofórmio, sozinhos ou em misturas binárias nas proporções (7:3) e (1:1), obtendo-se, desse procedimento, 76 frações, analisadas por CCDA e reunidas seguindo a metodologia anterior, resultando em nove grupos de frações (Quadro 3, pág. 70). O terceiro grupo (fração 21/37, 1,98 g) foi submetido à Cromatografia Líquida de Alta Eficiência (CLAE) para analisar o perfil dos compostos presentes na amostra.

Inicialmente, foi preparada uma solução com 1,0 mg da amostra em metanol grau HPLC, na concentração de 1 mg/mL, para análise qualitativa do perfil de constituintes da amostra em uma CLAE analítica. No método mais eficaz, a concentração de metanol variou de 0 a 23% ao longo de 120 minutos, com fluxo de 0,5 mL/min. Em seguida, para isolamento dos compostos majoritários, utilizou-se uma CLAE preparativa. Foi então preparada uma solução com 100 mg da amostra em 1000 µL de metanol grau HPLC. Como fase estacionária, utilizou-se sílica C-18 e, como fases móveis, metanol grau HPLC e água ultrapura acidificada (0,1% de ácido fórmico) em modo gradiente (Esquema 8, pág. 69). Por fim, as frações obtidas foram concentradas em um rotaevaporador a 40 °C.

No cromatograma (Figura 24, pág. 87) foi possível observar quatro picos principais, codificados como ***Pm*-1** (4,3 mg), ***Pm*-2** (5,1 mg), ***Pm*-3** (7,4 mg) e ***Pm*-4** (9,7 mg), que foram submetidos à análise espectroscópica de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ para elucidação das estruturas químicas dos compostos.

**Esquema 8.** Processamento cromatográfico da fase clorofórmica do EEB das partes aéreas de *Pavonia malacophylla.*




**Quadro 2.** Eluentes utilizados e frações obtidas no primeiro fracionamento cromatográfico da fase $CHCl_3$ de *Pavonia malacophylla*.

| ELUENTES | FRAÇÕES COLETADAS (100 mL) | FRAÇÕES REUNIDAS |
|---|---|---|
| **Hexano 100%** | 01-09 | 01/09<br>10/12<br>13/14<br>15/16 |
| **Hexano:AcOEt (9:1)** | 10-13 | |
| **Hexano:AcOEt (8:2)** | 14-16 | |
| **Hexano:AcOEt (7:3)** | 17-19 | |

| | | |
|---|---|---|
| **Hexano:AcOEt (6:4)** | 20-25 | 17/18<br>19/28<br>29/30<br>31/40<br>41/43<br>44/52<br>53/63<br>64/67 |
| **Hexano:AcOEt (1:1)** | 26-27 | |
| **Hexano:AcOEt (4:6)** | 28-30 | |
| **Hexano:AcOEt (3:7)** | 31-35 | |
| **Hexano:AcOEt (2:8)** | 36-39 | |
| **Hexano:AcOEt (1:9)** | 40-55 | |
| **AcOEt 100%** | 56-59 | |
| **AcOEt:MeOH (9:1)** | 60-64 | |
| **AcOEt:MeOH (8:2)** | 65-66 | |
| **$H_2O$ 100%** | 67 | |

**Quadro 3.** Eluentes utilizados e frações obtidas no fracionamento cromatográfico da subfração 53/63 da fase $CHCl_3$ de *Pavonia malacophylla*.

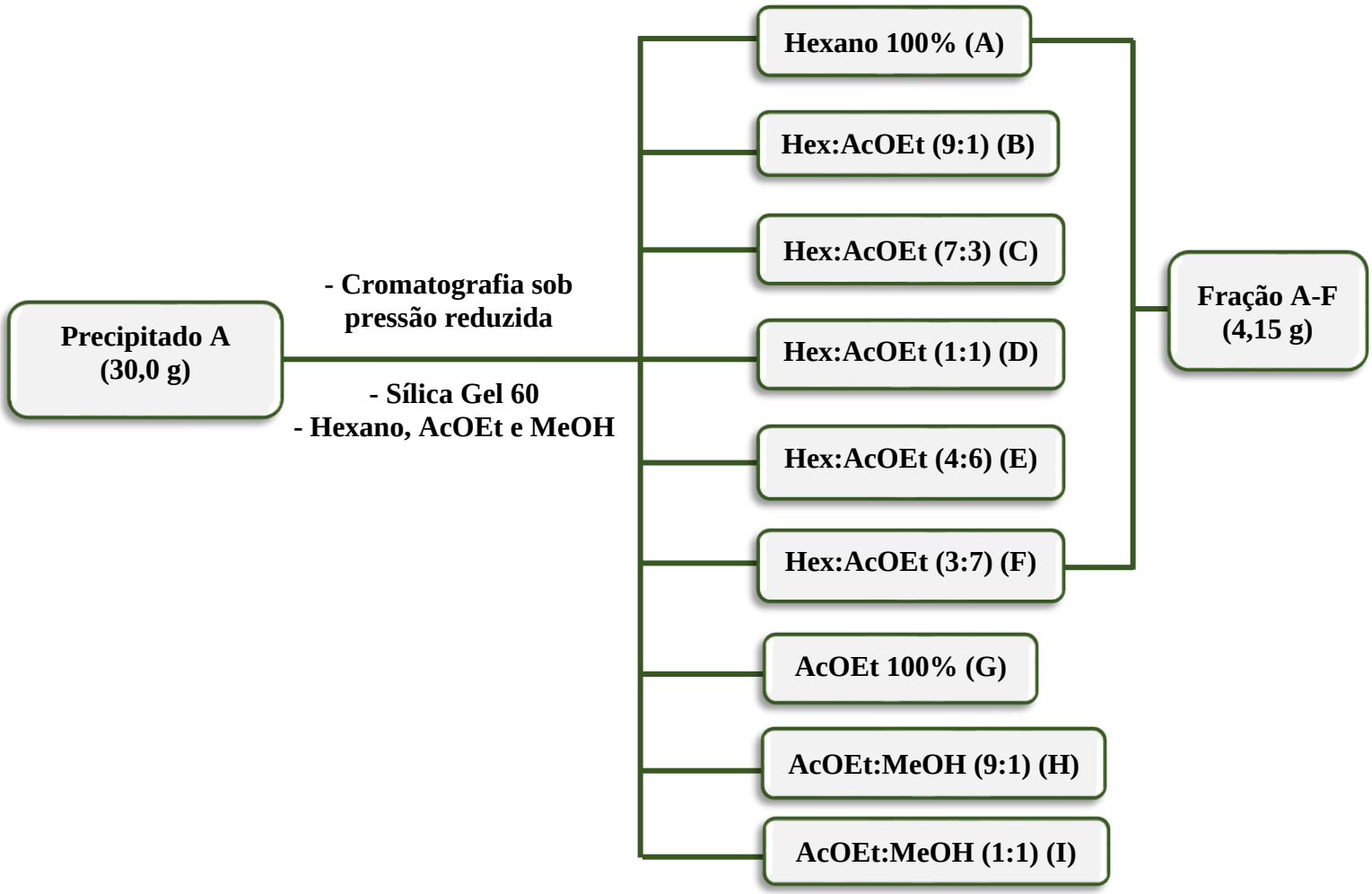
| ELUENTES | FRAÇÕES COLETADAS (30 mL) | FRAÇÕES REUNIDAS |
|---|---|---|
| **MeOH 100%** | 01-71 | 01/14<br>15/20<br>21/37<br>38/39<br>40/44<br>45/46<br>47/63<br>64/71<br>72/76 |
| **MeOH:$CHCl_3$ (7:3)** | 72-75 | |
| **MeOH:$CHCl_3$ (1:1)** | 76 | |

### 4.2.6 Processamento cromatográfico do precipitado A (30,0 g) do EEB das partes aéreas de *Pavonia cancellata*

O precipitado A, obtido da solução hidroalcoólica do EEB das partes aéreas de *Pavonia cancellata* foi submetido a uma cromatografia sob pressão reduzida utilizando como fase estacionária sílica gel 60 e como eluentes hexano, acetato de etila e metanol obedecendo um gradiente crescente de polaridade, resultando em 9 frações (A-I) que foram analisadas por CCDA e reunidas de acordo com suas semelhanças do perfil cromatográfico e seus fatores de retenção (Rfs) (Esquema 9, pág. 71).

As frações de A-F (4,15 g) foram reunidas e submetidas a uma coluna cromatográfica, utilizando sílica flash como fase estacionária e hexano, acetato de etila e metanol como fase móvel, seguindo o gradiente crescente de polaridade (Esquema 10, pág. 73).

**Esquema 9.** Processamento cromatográfico do precipitado A do EEB das partes aéreas de *Pavonia cancellata.*




Deste procedimento foram obtidas 31 frações que foram reunidas em 10 grupos, após análise por CCDA e de acordo com o seu perfil cromatográfico de eluição (Esquema 10, pág. 73; Quadro 4, pág. 74). A fração 25 apresentou-se na forma de um precipitado branco e pura frente a CCDA em diferentes sistemas de solventes, sendo codificada de ***Pc*-1** (31,0 mg). A reunião das frações 01/03 apresentou-se pura, frente a CCDA, e como um pó branco, sendo codificada como ***Pc*-8** (5,0 mg).

As frações 08/09 (213,9 mg) foram reunidas e submetidas à coluna cromatográfica, seguindo a metodologia descrita anteriormente. Deste procedimento foram obtidas 13 frações que foram analisadas por CCDA e reunidas seguido critério adotado anteriormente (Quadro 5, pág. 74). As frações 01, 02, 03/04, 05 e 07 apresentaram-se puras frente aos diferentes sistemas de solventes e receberam codificações de ***Pc*-9** (10,0 mg), ***Pc*-2** (50,0 mg), ***Pc*-10** (12,0 mg), ***Pc*-3** (35,0 mg), ***Pc*-4**

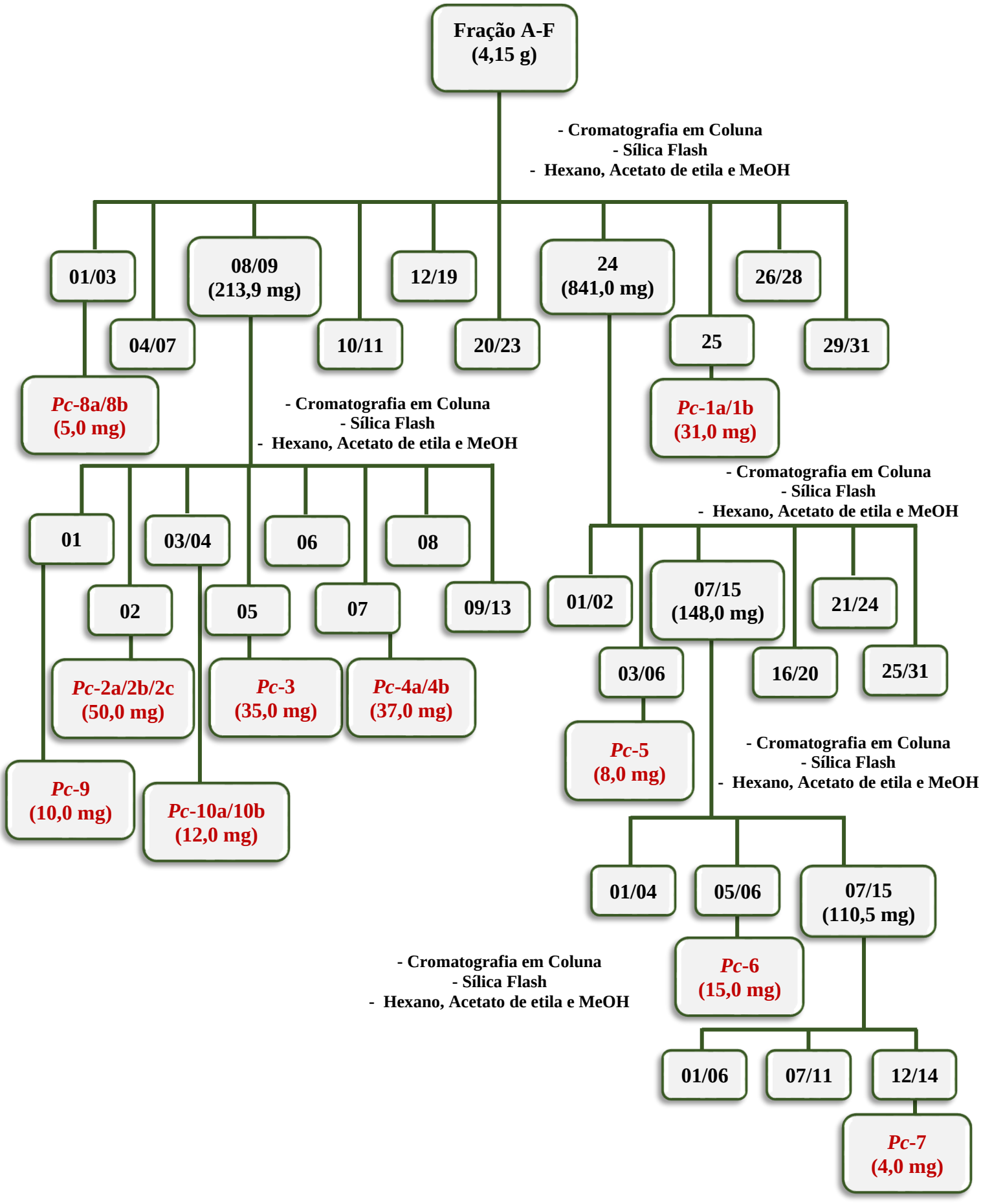
(37,0 mg), respectivamente (Esquema 10, pág. 73).

A fração 24 (841,0 mg) foi submetida a cromatografia utilizando sílica flash como fase estacionária e como fase móvel o hexano, acetato de etila e metanol, seguindo o gradiente crescente de polaridade. Deste procedimento, foram obtidas 31 frações, analisadas por CCDA e reunidas em 6 grupos, de acordo com a metodologia adotada nesta pesquisa (Quadro 6, pág. 75). O grupo 03/06 apresentou-se puro por CCDA em diferentes sistemas de solventes, sendo identificado pelo código ***Pc*-5** (8,0 mg) (Esquema 10, pág. 73).

O grupo 07/15 (148,0 mg) foi submetido a uma coluna cromatográfica, conforme a metodologia descrita anteriormente. Deste procedimento foram obtidas 15 frações que foram analisadas por CCDA e reunidas de acordo com o perfil cromatográfico de eluição em 3 sub-frações (Quadro 7, pág. 75). A sub-fração 05/06 apresentou-se pura frente aos diferentes sistemas de solventes e foi denominada ***Pc*-6** (15,0 mg) (Esquema 10, pág. 73).

A subfração 07/15 (110,5 mg) também foi submetida a uma coluna cromatográfica utilizando a metodologia anteriormente descrita, resultando em 14 frações, que foram analisadas por CCDA e reunidas de acordo com o seu perfil de eluição (Quadro 8, pág. 76). A fração 12/14 apresentou-se pura frente a diversos sistemas de solventes e codificado como ***Pc*-7** (4,0 mg) (Esquema 10, pág. 73).

**Esquema 10.** Processamento cromatográfico da fração A-F do precipitado A do EEB das partes aéreas de *Pavonia cancellata*.



**Quadro 4.** Eluentes utilizados e frações obtidas no primeiro fracionamento cromatográfico da fração A-F do precipitado A de *Pavonia cancellata*.

| ELUENTES | FRAÇÕES COLETADAS (125 mL) | FRAÇÕES REUNIDAS |
|---|---|---|
| **Hexano 100%** | 01 | 01/03<br>04/07<br>08/09<br>10/11<br>12/19<br>20/23<br>24<br>25<br>26/28<br>29/31 |
| **Hexano:AcOEt (98:02)** | 02 | |
| **Hexano:AcOEt (95:05)** | 03 | |
| **Hexano:AcOEt (93:07)** | 04 | |
| **Hexano:AcOEt (90:10)** | 05 | |
| **Hexano:AcOEt (88:12)** | 06 | |
| **Hexano:AcOEt (85:15)** | 07 | |
| **Hexano:AcOEt (80:20)** | 08 | |
| **Hexano:AcOEt (78:22)** | 09 | |
| **Hexano:AcOEt (75:25)** | 10 | |
| **Hexano:AcOEt (73:27)** | 11 | |
| **Hexano:AcOEt (70:30)** | 12 | |
| **Hexano:AcOEt (67:33)** | 13 | |
| **Hexano:AcOEt (63:37)** | 14 | |
| **Hexano:AcOEt (60:40)** | 15 | |
| **Hexano:AcOEt (58:42)** | 16 | |
| **Hexano:AcOEt (55:45)** | 17 | |
| **Hexano:AcOEt (53:47)** | 18 | |
| **Hexano:AcOEt (50:50)** | 19 | |
| **Hexano:AcOEt (45:55)** | 20 | |
| **Hexano:AcOEt (40:60)** | 21 | |
| **Hexano:AcOEt (35:55)** | 22 | |
| **Hexano:AcOEt (30:70)** | 23 | |
| **Hexano:AcOEt (20:80)** | 24 | |
| **Hexano:AcOEt (10:90)** | 25 | |
| **AcOEt 100%** | 26 | |
| **AcOEt:MeOH (95:05)** | 27 | |
| **AcOEt:MeOH (90:10)** | 28 | |
| **AcOEt:MeOH (85:15)** | 29 | |
| **AcOEt:MeOH (80:20)** | 30 | |
| **AcOEt:MeOH (70:30)** | 31 | |

**Quadro 5.** Eluentes utilizados e frações obtidas no fracionamento cromatográfico da subfração 08/09 da fração A-F do precipitado A de *Pavonia cancellata*.

| ELUENTES | FRAÇÕES COLETADAS (50 mL) | FRAÇÕES REUNIDAS |
|---|---|---|
| **Hexano 100%** | 01 | 01<br>02<br>03/04<br>05 |
| **Hexano:AcOEt (90:10)** | 02 | |
| **Hexano:AcOEt (80:20)** | 03 | |
| **Hexano:AcOEt (70:30)** | 04 | |

| | | |
|---|---|---|
| **Hexano:AcOEt (60:40)** | 05 | 06<br>07<br>08<br>09/13 |
| **Hexano:AcOEt (50:50)** | 06 | |
| **Hexano:AcOEt (40:60)** | 07 | |
| **Hexano:AcOEt (30:70)** | 08 | |
| **Hexano:AcOEt (20:80)** | 09 | |
| **Hexano:AcOEt (10:90)** | 10 | |
| **AcOEt 100%** | 11 | |
| **AcOEt:MeOH (90:10)** | 12 | |
| **AcOEt:MeOH (80:20)** | 13 | |

**Quadro 6.** Eluentes utilizados e frações obtidas no fracionamento cromatográfico da subfração 24 da fração A-F do precipitado A de *Pavonia cancellata*.

| ELUENTES | FRAÇÕES COLETADAS (50 mL) | FRAÇÕES REUNIDAS |
|---|---|---|
| **Hexano 100%** | 01 | 01/02<br>03/06<br>07/15<br>16/20<br>21/24<br>25/31 |
| **Hexano:AcOEt (90:10)** | 02-04 | |
| **Hexano:AcOEt (85:15)** | 05-08 | |
| **Hexano:AcOEt (80:20)** | 09-11 | |
| **Hexano:AcOEt (70:30)** | 12-14 | |
| **Hexano:AcOEt (60:40)** | 15-18 | |
| **Hexano:AcOEt (50:50)** | 19-21 | |
| **Hexano:AcOEt (40:60)** | 22-24 | |
| **Hexano:AcOEt (30:70)** | 25-26 | |
| **Hexano:AcOEt (20:80)** | 27 | |
| **Hexano:AcOEt (10:90)** | 28 | |
| **AcOEt 100%** | 29 | |
| **AcOEt:MeOH (90:10)** | 30 | |
| **AcOEt:MeOH (80:20)** | 31 | |

**Quadro 7.** Eluentes utilizados e frações obtidas no fracionamento cromatográfico da subfração 07/15 da fração 24 do precipitado A de *Pavonia cancellata*.

| ELUENTES | FRAÇÕES COLETADAS (50 mL) | FRAÇÕES REUNIDAS |
|---|---|---|
| **Hexano 100%** | - | 01/04<br>05/06<br>07/15 |
| **Hexano:AcOEt (90:10)** | 01 | |
| **Hexano:AcOEt (80:20)** | 02 | |
| **Hexano:AcOEt (70:30)** | 03 | |
| **Hexano:AcOEt (60:40)** | 04 | |
| **Hexano:AcOEt (50:50)** | 05 | |
| **Hexano:AcOEt (40:60)** | 06 | |
| **Hexano:AcOEt (30:70)** | 07-08 | |
| **Hexano:AcOEt (20:80)** | 09-10 | |
| **Hexano:AcOEt (10:90)** | 11 | |

| | | |
|---|---|---|
| **AcOEt 100%** | 12-13 | |
| **AcOEt:MeOH (90:10)** | 14 | |
| **AcOEt:MeOH (80:20)** | 15 | |

**Quadro 8.** Eluentes utilizados e frações obtidas no fracionamento cromatográfico da subfração 07/15 da fração 07/15 da fração 24 do precipitado A de *Pavonia cancellata*.

| ELUENTES | FRAÇÕES COLETADAS (50 mL) | FRAÇÕES REUNIDAS |
|---|---|---|
| **Hexano 100%** | 01 | 01/06<br>07/11<br>12/14 |
| **Hexano:AcOEt (90:10)** | 02 | |
| **Hexano:AcOEt (80:20)** | 03 | |
| **Hexano:AcOEt (70:30)** | 04 | |
| **Hexano:AcOEt (60:40)** | 05 | |
| **Hexano:AcOEt (50:50)** | 06 | |
| **Hexano:AcOEt (40:60)** | 07 | |
| **Hexano:AcOEt (30:70)** | 08 | |
| **Hexano:AcOEt (20:80)** | 09 | |
| **Hexano:AcOEt (10:90)** | 10 | |
| **AcOEt 100%** | 11 | |
| **AcOEt:MeOH (90:10)** | 12 | |
| **AcOEt:MeOH (80:20)** | 13 | |
| **AcOEt:MeOH (70:30)** | 14 | |

### 4.2.7 Processamento cromatográfico da fase AcOEt do EEB de *Pavonia cancellata*

A fase AcOEt (5,7 g) do EEB de *P. cancellata* foi cromatografada utilizando como fase estacionária o Sephadex LH-20 e como fase móvel o metanol e clorofórmio sozinhos ou em misturas binárias nas proporções (7:3) e (1:1). Deste procedimento foram obtidas 9 frações que foram analisadas por CCDA e reunidas em 5 grupos (Esquema 11, pág. 77; Quadro 9, pág. 78).

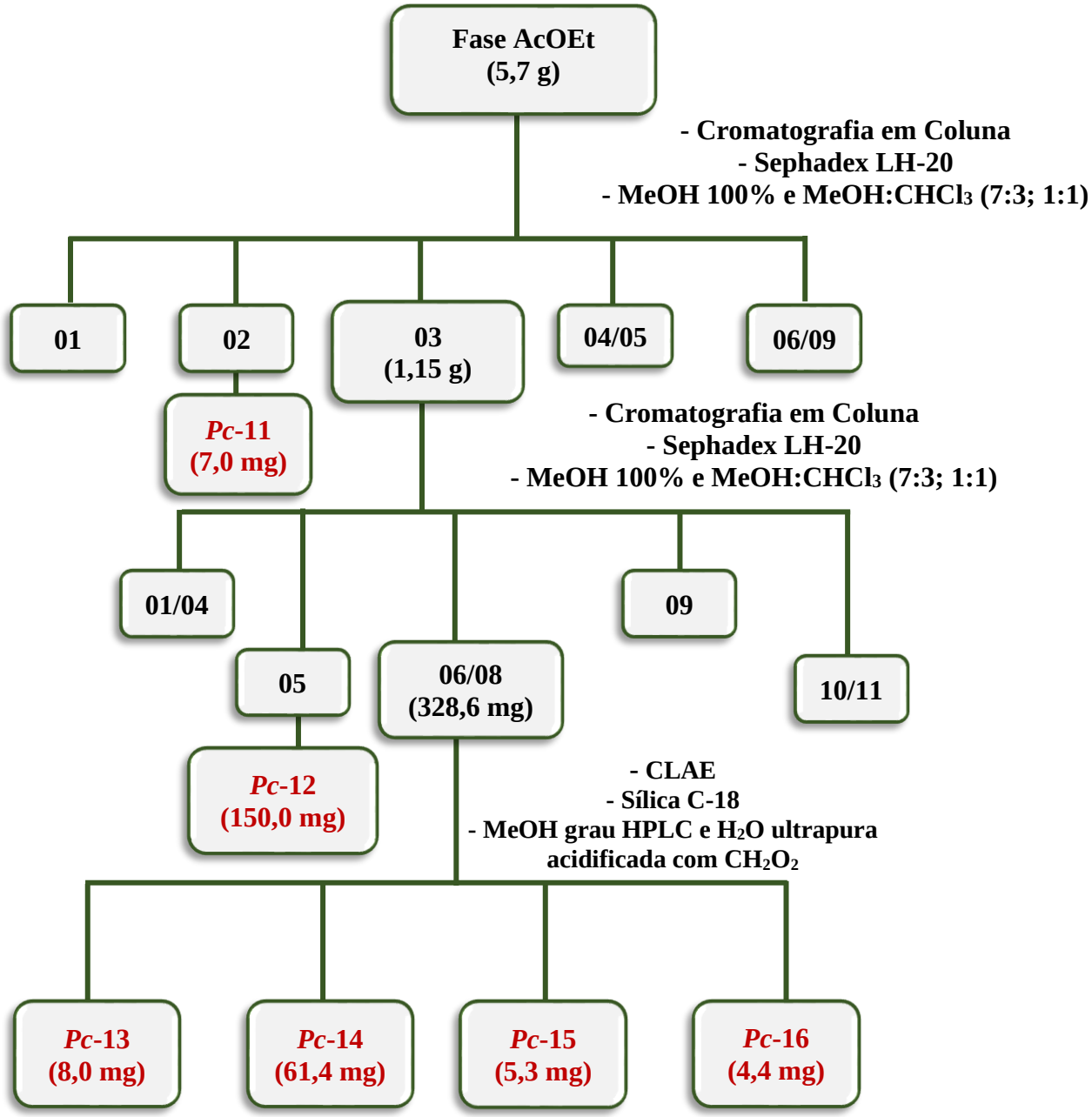
A fração 02 apresentou-se como um pó amarelado e pura quando analisada por CCDA em diversos sistemas de eluição, sendo codificada como ***Pc*-11** (7,0 mg). A sub-fração 03 (1,15 g) foi cromatografada utilizando a metodologia anteriormente descrita e forneceu 11 frações que foram analisadas por CCDA e reunidas em 5 grupos (Quadro 10, pág. 78). Destas, a fração 02 apresentou-se pura frente aos diferentes sistemas de solventes e recebeu a codificação de ***Pc*-12** (150,0 mg) (Esquema 11, pág. 77).

Com o objetivo de analisar o perfil e isolar os compostos presentes na sub-fração 06/08, seus 328,6 mg foram submetidos à Cromatografia Líquida de Alta Eficiência

(CLAE) seguindo a metodologia descrita no item 4.2.5 com a espécie *P. malacophylla* (pág. 67).

No cromatograma (Figura 121, pág. 180) foi possível observar quatro picos principais que foram codificados como ***Pc*-13** (8,0 mg), ***Pc*-14** (61,4 mg), ***Pc*-15** (5,3 mg) e ***Pc*-16** (4,4 mg). Para identificação das estruturas químicas dos compostos foram obtidos espectros de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$.

**Esquema 11.** Processamento cromatográfico da fase AcOEt do EEB das partes aéreas de *Pavonia cancellata*.



**Quadro 9.** Eluentes utilizados e frações obtidas no fracionamento cromatográfico da fase AcOEt de *Pavonia cancellata*.

| ELUENTES | FRAÇÕES COLETADAS (50 mL) | FRAÇÕES REUNIDAS |
|---|---|---|
| **MeOH 100%** | 01-06 | 01<br>02<br>03<br>04/05<br>06/09 |
| **MeOH:$CHCl_3$ (7:3)** | 07-08 | |
| **MeOH:$CHCl_3$ (1:1)** | 09 | |

**Quadro 10.** Eluentes utilizados e frações obtidas no fracionamento cromatográfico da fração 03 da fase AcOEt de *Pavonia cancellata*.

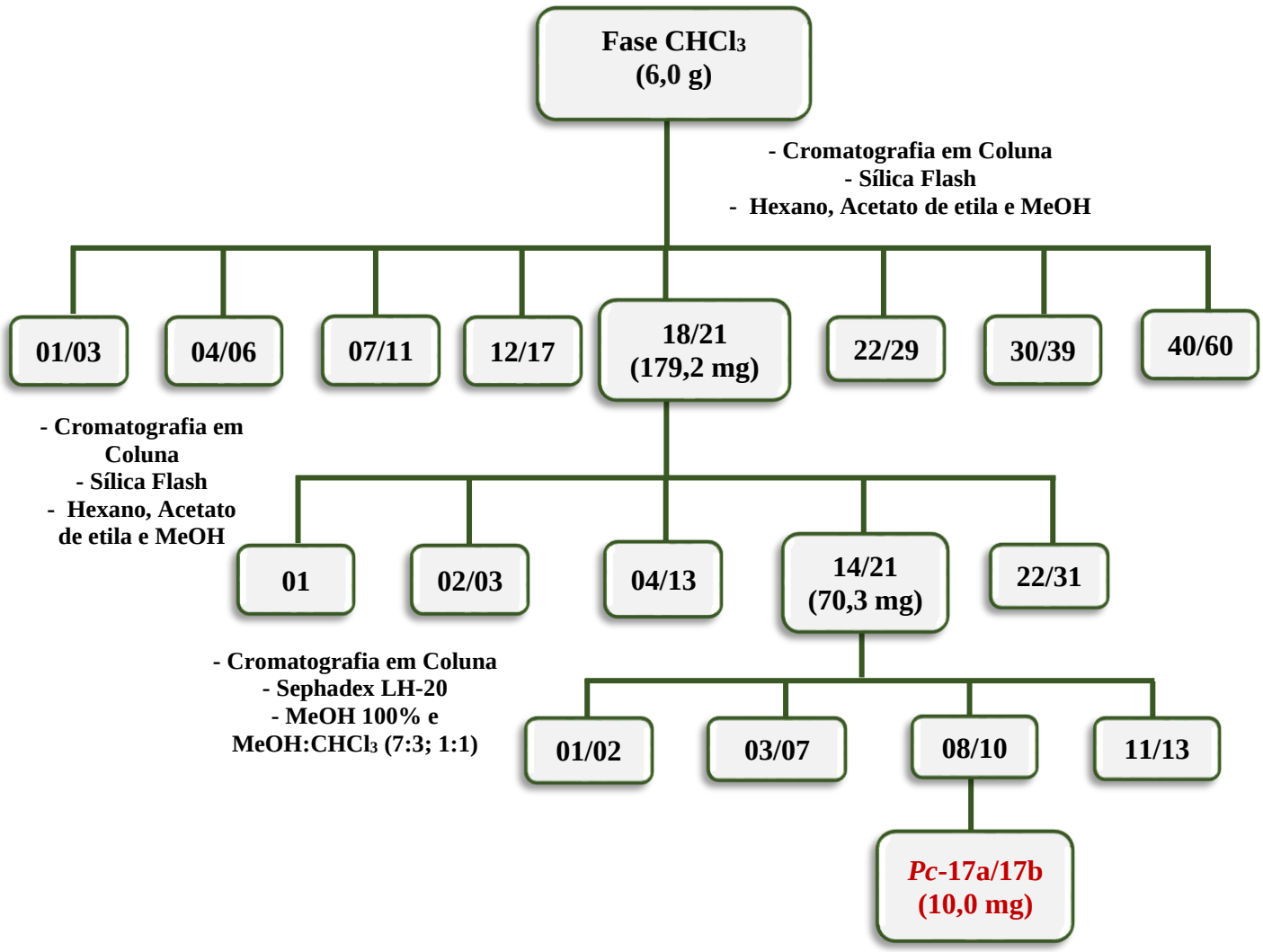
| ELUENTES | FRAÇÕES COLETADAS (30 mL) | FRAÇÕES REUNIDAS |
|---|---|---|
| **MeOH 100%** | 01-09 | 01/04<br>05<br>06/08<br>09<br>10/11 |
| **MeOH:$CHCl_3$ (7:3)** | 10 | |
| **MeOH:$CHCl_3$ (1:1)** | 11 | |

### 4.2.8 Processamento cromatográfico da fase $CHCl_3$ de *Pavonia cancellata*

A fase $CHCl_3$ (6,0 g) do EEB de *P. cancellata* foi cromatografada utilizando sílica flash como fase estacionária e, como fases móveis, hexano, acetato de etila e metanol, seguindo o gradiente crescente de polaridade. Deste procedimento, foram obtidas 60 frações, analisadas por CCDA e reunidas em 8 grupos de acordo com o perfil cromatográfico de eluição (Esquema 12 e Quadro 11, pág. 79).

O grupo 18/21 (179,2 mg) foi submetido a uma coluna cromatográfica utilizando a metodologia anteriormente descrita, resultando em 31 frações, que foram analisadas por CCDA (Quadro 12, pág. 80). A fração 14/21 (70,3 mg) oriunda da fração18/21, por coluna cromatográfica, utilizando a metodologia anteriormente descrita, resultando em 13 frações, das reuniões, a sub-fração 08/10 mostrou um perfil de pura, quando analisada por CCDA e recebeu o código ***Pc*-17** (10,0 mg) (Esquema 12, pág. 79; Quadro 13, pág. 80).

**Esquema 12.** Processamento cromatográfico da fase $CHCl_3$ do EEB das partes aéreas de *Pavonia cancellata*.




**Quadro 11.** Eluentes utilizados e frações obtidas no primeiro fracionamento cromatográfico da fase $CHCl_3$ de *Pavonia cancellata*.

| ELUENTES | FRAÇÕES COLETADAS (125 mL) | FRAÇÕES REUNIDAS |
|---|---|---|
| **Hexano 100%** | 01 | 01/03<br>04/06<br>07/11<br>12/17<br>18/21<br>22/29<br>30/39<br>40/60 |
| **Hexano:AcOEt (98:02)** | 02 | |
| **Hexano:AcOEt (95:05)** | 03 | |
| **Hexano:AcOEt (90:10)** | 04 | |
| **Hexano:AcOEt (85:15)** | 05-07 | |
| **Hexano:AcOEt (80:20)** | 08-11 | |
| **Hexano:AcOEt (75:25)** | 12/17 | |
| **Hexano:AcOEt (70:30)** | 18-21 | |
| **Hexano:AcOEt (65:35)** | 22-25 | |
| **Hexano:AcOEt (60:40)** | 26-29 | |
| **Hexano:AcOEt (55:45)** | 30-33 | |

| | | |
|---|---|---|
| **Hexano:AcOEt (50:50)** | 34-37 | |
| **Hexano:AcOEt (45:55)** | 38-40 | |
| **Hexano:AcOEt (40:60)** | 41-42 | |
| **Hexano:AcOEt (35:65)** | 43-45 | |
| **Hexano:AcOEt (30:70)** | 46-48 | |
| **Hexano:AcOEt (25:75)** | 49-50 | |
| **Hexano:AcOEt (20:80)** | 51 | |
| **Hexano:AcOEt (15:85)** | 52 | |
| **Hexano:AcOEt (10:90)** | 53 | |
| **AcOEt 100%** | 54-55 | |
| **AcOEt:MeOH (95:05)** | 56 | |
| **AcOEt:MeOH (90:10)** | 57 | |
| **AcOEt:MeOH (85:15)** | 58 | |
| **AcOEt:MeOH (80:20)** | 59 | |
| **AcOEt:MeOH (70:30)** | 60 | |
| **$H_2O$ 100%** | 61 | |

**Quadro 12.** Eluentes utilizados e frações obtidas no processamento cromatográfico da fração 18/21 da fase $CHCl_3$ de *Pavonia cancellata*.

| ELUENTES | FRAÇÕES COLETADAS (30 mL) | FRAÇÕES REUNIDAS |
|---|---|---|
| **Hexano 100%** | 01 | 01<br>02/03<br>04/13<br>14/21<br>22/31 |
| **Hexano:AcOEt (90:10)** | 02-04 | |
| **Hexano:AcOEt (80:20)** | 05-07 | |
| **Hexano:AcOEt (70:30)** | 08-11 | |
| **Hexano:AcOEt (60:40)** | 12-15 | |
| **Hexano:AcOEt (50:50)** | 16-17 | |
| **Hexano:AcOEt (40:60)** | 18-19 | |
| **Hexano:AcOEt (30:70)** | 20 | |
| **Hexano:AcOEt (20:80)** | 21-22 | |
| **Hexano:AcOEt (10:90)** | 23/24 | |
| **AcOEt 100%** | 25 | |
| **AcOEt:MeOH (95:05)** | 26-27 | |
| **AcOEt:MeOH (90:10)** | 28-29 | |
| **AcOEt:MeOH (80:20)** | 30-31 | |

**Quadro 13.** Eluentes utilizados e frações obtidas no fracionamento cromatográfico da subfração 14/21 da fase $CHCl_3$ de *Pavonia cancellata*.

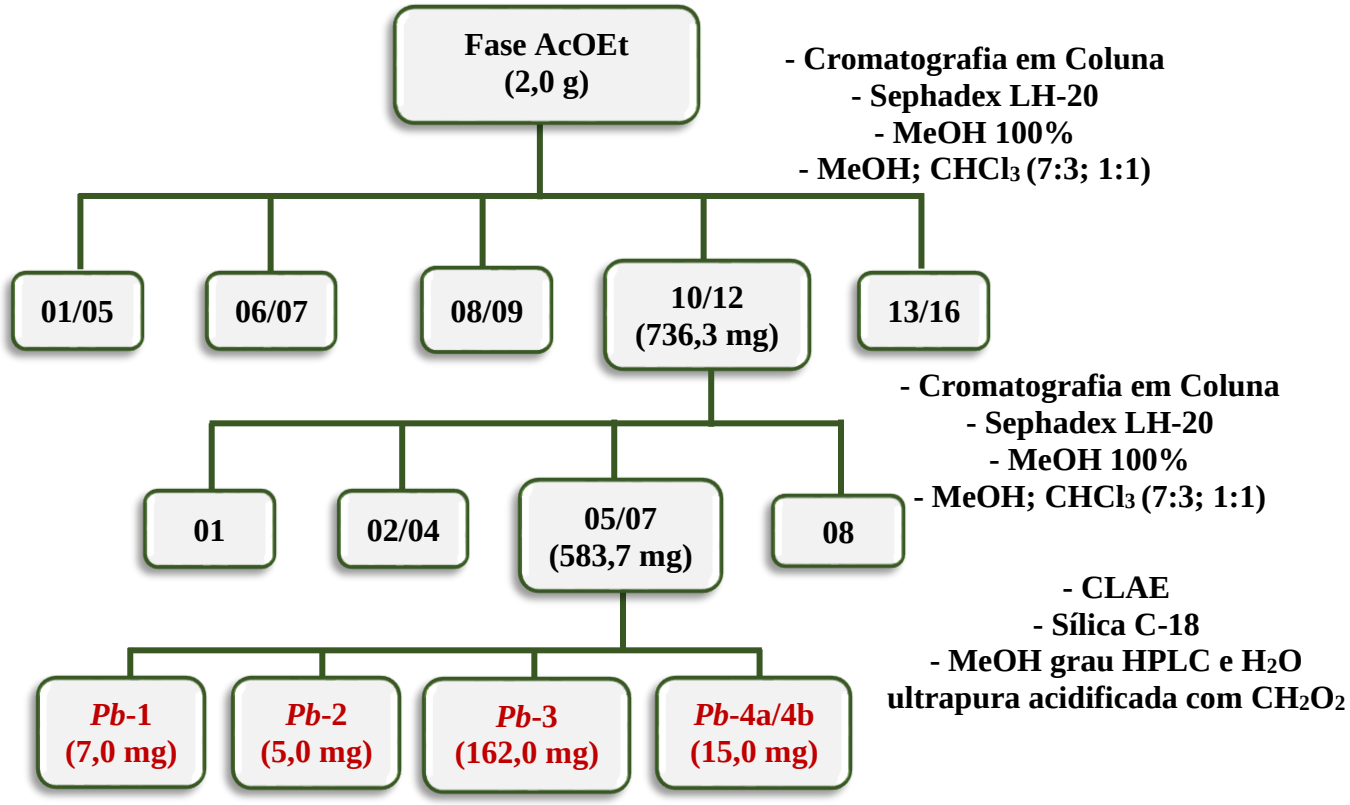
| ELUENTES | FRAÇÕES COLETADAS (30 mL) | FRAÇÕES REUNIDAS |
|---|---|---|
| **MeOH 100%** | 01-10 | 01/02<br>03/07<br>08/10<br>11/13 |
| **MeOH:$CHCl_3$ (7:3)** | 11-12 | |
| **MeOH:$CHCl_3$ (1:1)** | 13 | |

### 4.2.9 Processamento cromatográfico da fase AcOEt de *Pavonia blanchetiana*

A fase AcOEt (2,0 g) do EEB de *P. blanchetiana* foi cromatografada utilizando como fase estacionária o Sephadex LH-20 e como fase móvel o metanol e clorofórmio sozinhos ou em misturas binárias nas proporções (7:3) e (1:1). Deste procedimento foram obtidas 16 frações que foram analisadas por CCDA e reunidas em 5 grupos (Esquema 13, pág. 81; Quadro 14, pág. 82). A sub-fração 10/12 (736,3 mg) foi cromatografada utilizando a metodologia anteriormente descrita e forneceu 08 frações, que foram analisadas por CCDA e reunidas em 4 grupos de acordo com o seu perfil cromatográfico de eluição (Quadro 15, pág. 82).

Destas, a subfração 05/07 (583,7 mg) foi submetida à Cromatografia Líquida de Alta Eficiência (CLAE) com o objetivo de analisar o perfil de compostos presentes na amostra e isolá-los, seguindo a metodologia descrita para as espécies *P. malacophylla* e *P. cancellata*. No cromatograma (Figura 165, pág. 215), foi possível observar quatro picos principais, codificados como ***Pb*-1** (4,3 mg), ***Pb*-2** (5,1 mg), ***Pb*-3** (7,4 mg) e ***Pb*-4** (9,7 mg), submetidos à análise espectroscópica de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ para elucidação das estruturas químicas dos compostos.

**Esquema 13.** Processamento cromatográfico da fase AcOEt do EEB das partes aéreas de *Pavonia blanchetiana*.



**Quadro 14.** Eluentes utilizados e frações obtidas no fracionamento cromatográfico da fase AcOEt de *Pavonia blanchetiana*.

| ELUENTES | FRAÇÕES COLETADAS (30 mL) | FRAÇÕES REUNIDAS |
|---|---|---|
| **MeOH 100%** | 01-12 | 01/05<br>06/07<br>08/09<br>10/12<br>13/16 |
| **MeOH:$CHCl_3$ (7:3)** | 13-15 | |
| **MeOH:$CHCl_3$ (1:1)** | 16 | |

**Quadro 15.** Eluentes utilizados e frações obtidas no fracionamento cromatográfico da subfração 10/12 da fase AcOEt de *Pavonia blanchetiana*.

| ELUENTES | FRAÇÕES COLETADAS (30 mL) | FRAÇÕES REUNIDAS |
|---|---|---|
| **MeOH 100%** | 01-06 | 01<br>02/04<br>05/07<br>08 |
| **MeOH:$CHCl_3$ (7:3)** | 07 | |
| **MeOH:$CHCl_3$ (1:1)** | 08 | |

### 4.3 Análise por Cromatografia Gasosa-Espectrômetro de Massas (CG-EM) da fração 01/03 da fração A-F do precipitado A do EEB das partes aéreas de *Pavonia cancellata*.

Para a análise da fração acima citada foi utilizado um instrumento de cromatografia gasosa acoplada a um espectrômetro de massas (CG-EM), modelo SHIMADZU QP2000-PLUS-A, nas seguintes condições operacionais: coluna capilar de sílica fundida, modelo RTX-5 (30 m de comprimento x 0,25 mm de diâmetro interno x 0,25 µm de espessura do filme) (Shimadzu, Japão), com fluxo de 1,0 mL/min de hélio como gás de arraste; a temperatura inicial do forno foi de 200ºC por 2 min, mantendo uma rampa de temperatura de 20ºC/min elevando até 300ºC e permanecendo nessa temperatura por 10 min.

As temperaturas do injetor e do detector foram de 220ºC e 260ºC, respectivamente. Os compostos foram identificados por comparação de seus espectros de massas obtidos, com os registros da biblioteca computacional (62 nist.Lib).

### 4.4 Análise de LC-ESI-Q-TOF-MS da fase n-ButOH e fase hidroalcoólica do EEB das partes aéreas de *Pavonia blanchetiana*

Cinco microlitros da amostra (200 µg/mL) foram injetados no LC-40D X3 (Shimadzu) equipado com os módulos CBM-40, DGU-40S, LC 40D X3, SIL-40C X3 e CTD-40S, acoplado a um espectrômetro de massas LCMS-9050 (Shimadzu) com uma fonte de ionização por eletrospray (IES) e um analisador Quadrupole Time-of-Flight (Q-TOF). Os experimentos de CLAE foram realizados utilizando uma coluna C18 (Ascentis-150 mm x 4,6 mm x 2,7 mm).

A fase móvel foi composta por uma solução de ácido fórmico/água a 0,1% (v/v) (solvente A) e metanol (solvente B). Um gradiente linear (5-100%) foi realizado para eluição em 20 min., permanecendo em 100% de B por 7 min., com um fluxo de 0,3 mL/min. e a temperatura da coluna mantida em 40ºC.

Os parâmetros de análise para espectrômetros de massa foram os seguintes: voltagem capilar (-3,0 kV), fluxo do gás nebulizador 3,0 L/min., fluxo do gás de secagem 10 mL/min. e temperatura da interface em 300ºC. As substâncias foram analisadas no modo de ionização negativo (*m/z*) 100-1000).

Para fragmentação utilizou-se o gás argônio na célula de colisão, que foi operada com energia de colisão (CE) de 5-55. Foram monitorados íons de produtos de *m/z* 50-1000.

### 4.5 Avaliação da atividade larvicida frente às larvas L4 do *Aedes aegypti* L.

O potencial exploratório da atividade larvicida das espécies *P. malacophylla*, *P. cancellata* e *P. blanchetiana* frente às larvas L4 do mosquito *Ae. aegypti* foi realizado nas dependências do Laboratório de Biotecnologia Aplicada a Parasitas e Vetores (LAPAVET), com auxílio da Profa. Dra. Fabíola da Cruz Nunes, no Centro de Biotecnologia da Universidade Federal da Paraíba. Os testes biológicos basearam-se na metodologia de Fernandes (2021).

#### 4.5.1 Monitoramento do ciclo de vida do *Aedes aegypti* L.

Os mosquitos da linhagem RecLab-JP foram obtidos de uma colônia cíclica mantida há mais de sete anos no LAPAVET.

Para a manutenção do ciclo de vida do *Ae. Aegypti*, estes foram mantidos em uma câmara climatizada do tipo Biological Oxygen Demand (BOD), sob condições de temperatura controlada de 28 ± 2°C, umidade relativa do ar de 75 ± 5% e fotoperíodo de 12 horas de claro e escuro (WHO, 2013; NUNES et al., 2015).

A padronização das condições de manutenção do ciclo de vida do mosquito nesses ensaios laboratoriais é essencial para garantir a confiabilidade e reprodutibilidade dos dados (WHO, 2013). Para a realização dos experimentos, foram utilizadas larvas no quarto estágio de desenvolvimento (L4) do *Ae. aegypti*.

Previamente foram realizados todos os processos de cromatografia líquido-líquido dos EEBs das três espécies em estudo para obtenção de suas fases hexânicas, clorofórmica, acetato de etila, n-butanólica e hidroalcoólica, com posterior exposição dessas amostras frente às larvas L4 do *Ae. aegypti*.

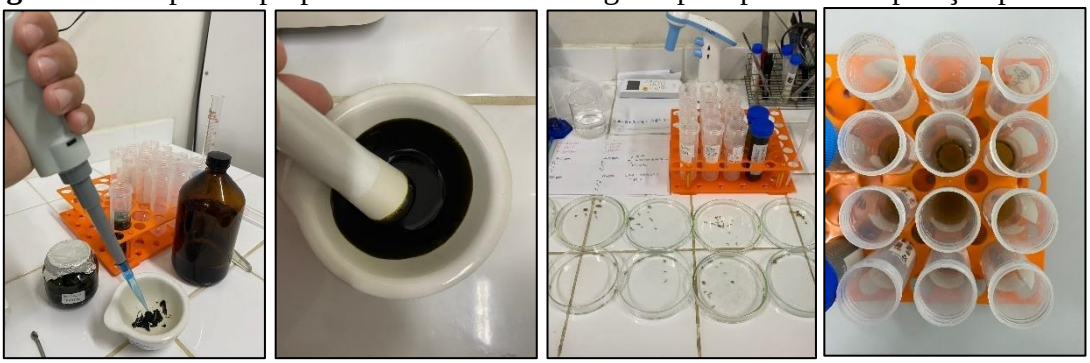
### 4.5.2 Atividade larvicida

Para o desenvolvimento larval em meio aquático, os ovos de *Ae. aegypti* foram imersos em uma bandeja plástica contendo água destilada, acrescida de aproximadamente 0,5 g de ração triturada. Após a eclosão, as larvas foram acompanhadas até atingir o quarto estágio de desenvolvimento (L4), que necessita aproximadamente de quatro a cinco dias, tempo necessário para que as mesmas atinjam o tamanho ideal para os bioensaios, optando-se assim por trabalhar com larvas L4 devido à maior facilidade de visualização e resistência corporal em relação aos estágios mais imaturos de vida do *Ae. aegypti* (PEREIRA et al., 2014).

A atividade larvicida dos extratos, fases e compostos fenólicos frente às larvas do mosquito *Ae. aegypti* foram avaliadas de acordo com a metodologia descrita por Fernandes (2020). Vinte e cinco larvas (L4) de *Ae. aegypti*, foram transferidas do insetário, com auxílio de pipetas Pasteur de plástico, para tubos Falcon contendo 10 mL de solução, as substâncias teste em diferentes concentrações foram diluídas em 29 mL de água destilada e 1,0 mL de DMSO 1% (Figura 23, pág. 85).

A concentração de DMSO que foi utilizada, baseia-se no perfil não tóxico do solvente frente às larvas dos testes, bem como do controle negativo (OLIVEIRA, 2013; BELLÉ, 2017).

**Figura 23.** Etapas do preparo das amostras biológicas para posterior exposição por 24h.



**Fonte:** Elaborado pelo autor (2026).

Como controle negativo, as larvas foram tratadas apenas com água destilada e com DMSO a 1%. Como controle positivo, 25 larvas L4 foram expostas a um inseticida de composição: Imiprotrina 0,02%, Permetrina 0,05% e Esbiotrina 0,1% (NUNES et al., 2015).

Todas as larvas permaneceram sob condições normalizadas de temperatura, umidade relativa e fotoperíodo. Para a análise posterior da atividade dos extratos, fases e substâncias testes, pré-estabelecidas baseadas na percentagem média de mortalidade das larvas após 24 horas, sendo (> 75% [resultado promissor], 50-75% [parcialmente promissor], 25-50% [fracamente promissor], e < 25% [inativo]), baseado na equação abaixo (SANTOS et al., 2012).

$$\text{Porcentagem de mortalidade larval} = \frac{\text{Número de larvas mortas}}{25} \text{x } 100$$

### 4.5.3 Análise estatística

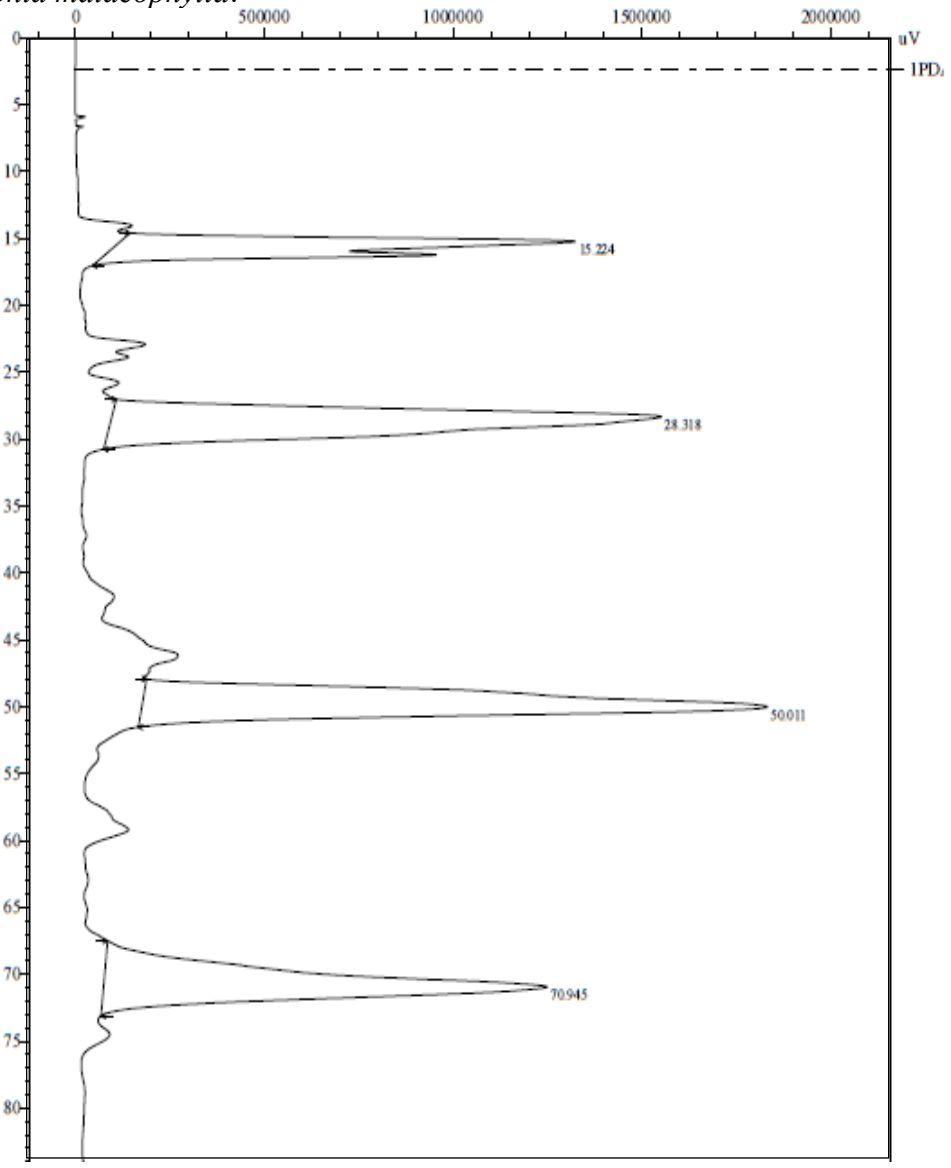
A análise estatística foi realizada utilizando o programa GraphPad Prism® versão 8.0 para Windows (GraphPad Software, San Diego, CA). Diferenças significativas entre os grupos foram analisadas por ANOVA e pós-teste de Tukey ($p < 0.05$).

# 5. Resultados e Discussão

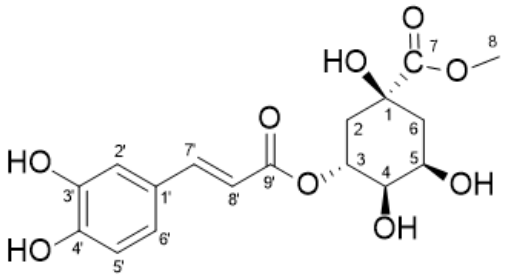
## 5.1 Substâncias isoladas das partes aéreas de *Pavonia malacophylla*

O estudo fitoquímico das partes aéreas de *Pavonia malacophylla* resultou no isolamento e caracterização estrutural de vinte e dois compostos, sendo dezoito destes compostos isolados e relatados no artigo "**Phytochemical study from the aerial parts of *Pavonia malacophylla* (Malvaceae) and evaluation of its antimicrobial potential**" (Anexo 2, pág. 318), complementados por quatro constituintes químicos obtidos a partir do isolamento por HPLC, destacados na Figura 24 e com suas estruturas expostas abaixo, no Quadro 16 (pág. 88).

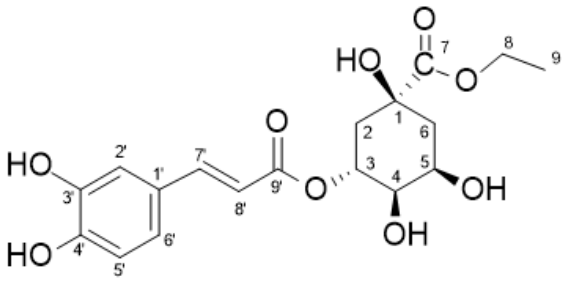
**Figura 24.** Cromatograma da fração 21/37 da fase clorofórmica do EEB das partes aéreas de *Pavonia malacophylla*.



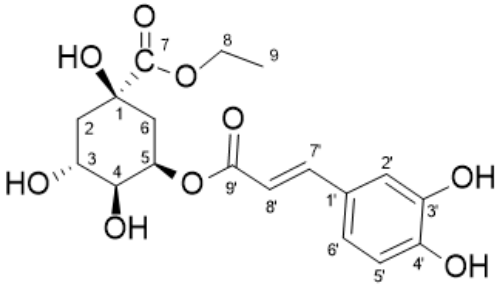
**Quadro 16**. Substâncias isoladas das partes aéreas de *Pavonia malacophylla*.



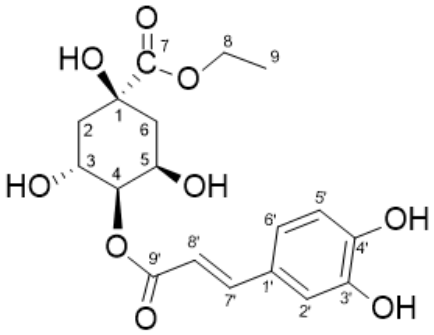
***Pm*-1**: Ácido 3-*O*-cafeoilquínico metil-éster



***Pm*-2**: Ácido 3-O-cafeoilquínico etil-éster



***Pm*-3**: Ácido 5-O-cafeoilquínico etil-éster



***Pm*-4**: Ácido 4-O-cafeoilquínico etil-éster

## 5.2 Caracterização estrutural das substâncias isoladas de *Pavonia malacophylla*

### 5.2.1 Determinação estrutural de *Pm*-1

A substância codificada como *Pm*-1 apresentou-se em forma de sólido amarronzado. Em seu cromatograma apresenta-se como um pico com tempo de retenção de 15,224 minutos (Figura 24, pág. 87).

Seu espectro de RMN $^{1}$H de *Pm*-1 obtido a 400 MHz em DMSO-$d_6$ (Figura 26, pág. 92), mostrou sinais de $\delta_H$ entre 6,19 e 7,47 que permitiram propor que a substância apresenta uma estrutura fenólica.

Três sinais em $\delta_H$ 7,02 (s), $\delta_H$ 6,75 (d, $J$ =8,0 Hz) e $\delta_H$ 6,97 (d, $J$ =8,0 Hz), quando comparados com dados da literatura (NGUYEN et al., 2024) permitiram sugerir que *Pm*-1 tratava-se de uma substância fenólica com um sistema do tipo ABX. As absorções com o perfil de dois dupletos acoplados em *trans* em $\delta_H$ 7,46 (d, $J$ =15,8 Hz) e $\delta_H$ 6,21 (d, $J$ =15,8 Hz), ambos com integral para um hidrogênio, mostraram que a molécula possui uma dupla ligação com dois hidrogênios em relação *trans*. Esses dados, adicionados a

sugestão de que *Pm*-1 possui um sistema ABX e corroborados por trabalhos anteriores da equipe com espécies de *Pavonia*, (ALBUQUERQUE et al, 2022; 2025) permitiram propor que este composto poderia se tratar do ácido cafeico (Figura 24, pág. 87), onde os sinais em $\delta_H$ 7,02 (s), $\delta_H$ 6,75 (d, $J$ =8,0 Hz) e $\delta_H$ 6,97 (d, $J$ =8,0 Hz) são atribuídos aos hidrogênios H-2', H-5' e H-6', respectivamente, da unidade cafeoil e os sinais em $\delta_H$ 7,46 (d, $J$ =15,8 Hz) e $\delta_H$ 6,21 (d, $J$ =15,8 Hz), referem-se aos hidrogênios olefínicos H-7' e H-8', respectivamente, do sistema *trans* (Figura 26, pág. 92), além de um sinal adicional em $\delta_H$ 3,51 (s) atribuído a um sinal de metoxila (GE et al., 2018).

A análise do seu espectro de RMN $^1$H e sua expansão revelaram um conjunto de absorções para três hidrogênios oximetínicos, com sinais em $\delta_H$ 5,28 (d, $J$ =7,0 Hz), $\delta_H$ 4,84 (s) e $\delta_H$ 3,60 (m), que, quando comparados com dados da literatura (GE et al., 2018) possibilitou sugerir que o composto *Pm*-1 possui um grupo com a estrutura similar ao ácido quínico, haja visto que os sinais acima evidenciados correspondem aos hidrogênios H-4, H-5 e H-3, respectivamente, do referido ácido quando na forma de éster (GE et al., 2018).

Esta sugestão foi fortalecida pelo conjunto de sinais na região entre $\delta_H$ 1,56 e $\delta_H$ 1,85 ppm (m), referentes a hidrogênios metilênicos condizentes com os hidrogênios H-2a/H-2b e H-6a/H-6b de um radical éster (Figura 26, pág. 92), o que reforça a sugestão de que *Pm*-1 possui em sua estrutura, um derivado do ácido quínico (KUCZKOWIAK et al., 2014).

Um simpleto em $\delta_H$ 3,51, integrando para três hidrogênios, foi atribuído aos hidrogênios metoxílicos na posição H-8, sendo consistente com a presença de um grupo metoxila. Essa atribuição foi corroborada pelas absorções observadas no espectro de RMN de $^1$H, e a comparação com dados da literatura permitiu inferir a presença de uma metoxila ligada à unidade de ácido quínico (GE et al., 2018).

Ao analisar o espectro de RMN $^{13}$C e suas expansões utilizando a técnica APT de *Pm*-1 obtido a 100 MHz em DMSO-$d_6$, foi possível observar dezenove deslocamentos químicos, atribuídos a 8 carbonos metínicos, 2 carbonos metilênicos, 1 carbono metoxílico e 6 carbonos não hidrogenados (Figura 27, pág. 93).

Os sinais em $\delta_C$ 72,0, $\delta_C$ 70,6, $\delta_C$ 70,4, $\delta_C$ 67,4, $\delta_C$ 38,0 e $\delta_C$ 36,3 foram atribuídos aos carbonos C-1, C-4, C-3, C-5, C-6 e C-2, respectivamente. Foi observado ainda, um sinal de carbonila de éster em $\delta_C$ 173,3, atribuído ao carbono C-7 (KUCZKOWIAK et al., 2014), e um sinal em $\delta_C$ 51,22 correspondendo ao carbono C-8 da estrutura do

derivado de ácido quínico. A presença da unidade de cafeoil foi ratificada pela presença dos sinais em $\delta_C$ 148,3 e $\delta_C$ 145,6 atribuídos aos carbonos C-3' e C-4' desta unidade, sendo mais desprotegidos do que os demais carbonos aromáticos por influência do efeito eletronegativo dos átomos de oxigênio (-OH) ligados. Outros sinais em $\delta_C$ 125,8, $\delta_C$ 114,9, $\delta_C$ 115,9 e $\delta_C$ 121,3 foram atribuídos aos carbonos C-1', C-2', C-5' e C-6', respectivamente, do sistema aromático ABX (Figura 27, pág. 93) (LIU et al., 2013).

A presença da carbonila da unidade cafeoil foi confirmada por um sinal em $\delta_C$ 166,0 atribuído ao carbono C-9'. Os sinais em $\delta_C$ 144,6 e $\delta_C$ 114,7 foram evidenciados e atribuídos aos carbonos C-7' e C-8', sendo o carbono C-7' mais desprotegido do que C-8' por influência do sistema carbonílico *α*, *β*-insaturado (Figura 27, pág. 93) (NGUYEN et al., 2024).

A estrutura do composto foi confirmada através das técnicas bidimensionais de HMQC e HMBC, onde estes apresentaram mapas de contorno que levou à confirmação estrutural da molécula proposta.

O espectro de correlação heteronuclear HSQC, apresentou um mapa de contorno mostrando correlações que permitiram atribuir os hidrogênios ligados diretamente aos seus respectivos carbonos. As correlações entre os sinais $\delta_H$ 7,02 (H-2') e $\delta_C$ 114,9 (C-2'); $\delta_H$ 6,97 (H-6') e $\delta_C$ 121,3 (C-6'); $\delta_H$ 6,75 (H-5') e $\delta_C$ 115,9 (C-5'); $\delta_H$ 7,46 (H-7') e $\delta_C$ 144,6 (C-7') e $\delta_H$ 6,21 (H-8') e $\delta_C$ 114,7 (C-8'), confirmaram a presença da unidade cafeoil. Outras correlações entre os sinais $\delta_H$ 5,27 (H-4) e $\delta_C$ 70,4 (C-4); $\delta_H$ 3,66 (H-3) e $\delta_C$ 70,6 (C-3) e $\delta_H$ 4,84 (H-5) e $\delta_C$ 68,9 (C-5), correspondentes ao derivado de ácido quínico e $\delta_H$ 3,51 (H-8) e $\delta_C$ 51,2 (C-8), confirmando a existência do radical metil ligado à estrutura (Figura 28, pág. 93; Tabela 3, pág. 92), além da correlação direta do hidrogênio da metoxila em $\delta_H$ 3,51 com seu respectivo carbono em $\delta_C$ 51,2.

O espectro de correlação heteronuclear HMBC evidenciou sinais que puderam confirmar a molécula de *Pm*-1, onde se observou correlações entre os sinais $\delta_H$ 7,46 (H-7') com C-2', C-6' e C-9' a $^3$J e com C-1' a $^2$J; $\delta_H$ 6,21 (H-8') com C-1' a $^3$J e com C-9' a $^2$J; $\delta_H$ 6,75 (H-5') com C-1' a $^3$J e com C-4' $^2$J; $\delta_H$ 7,02 (H-2') com C-3' a $^2$J; e $\delta_H$ 3,51 (H-8) com C-7 a $^3$J (Figura 29, pág. 94; Tabela 3, pág. 92).

A esterificação da unidade quínica no carbono C-7 foi atribuída neste ponto após comparações com dados da literatura (GE et al., 2018).

A análise dos dados espectrais de RMN $^1$H e RMN $^{13}$C juntamente com comparações com os dados da literatura (Tabela 2, pág. 91) permitiram constatar que *Pm*-

1 se tratava do derivado do ácido 3-*O*-cafeoilquínico metil-éster (Figura 25, pág. 91), composto este isolado pela primeira vez no gênero *Pavonia*.

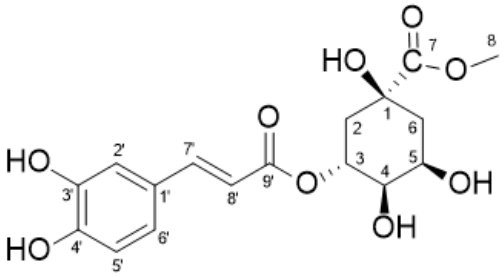


**Figura 25.** Ácido 3-*O*-cafeoilquínico metil-éster

**Tabela 2.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pm*-1** (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (ácido 3-*O*-cafeoilquínico metil-éster) (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz) (GE et al., 2018).

| **C** | ***Pm*-1** | | ***Mo*-1** | |
|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** |
| **1** | - | 72,03 | - | 74,14 |
| **2** | 1,64 (m, H-2a)<br>1,56 (m, H-2b) | 36,31 | 2,06 (m) | 36,34 |
| **3** | 5,27 (d, *J* =7,0 Hz) | 70,44 | 5,11 (d, *J* =3,6 Hz) | 70,62 |
| **4** | 3,66 (m) | 70,60 | 3,64 (s) | 71,34 |
| **5** | 4,84 (s) | 68,96 | 3,98 (m) | 68,31 |
| **6** | 1,64 (m, H-6a)<br>1,85 (m, H-6b) | 37,98 | 2,06 (m, H-6a)<br>1,86 (m, H-6b) | 37,60 |
| **7** | - | 173,25 | - | 174,17 |
| **1'** | - | 125,75 | - | 126,15 |
| **2'** | 7,02 (s) | 114,93 | 7,06 (s) | 116,42 |
| **3'** | - | 148,27 | - | 148,86 |
| **4'** | - | 145,62 | - | 146,05 |
| **5'** | 6,75 (d, *J* =8,0 Hz) | 115,85 | 6,79 (d, *J* =8,0 Hz) | 115,01 |
| **6'** | 6,97 (d, *J* =8,0 Hz) | 121,26 | 6,95 (d, *J* =8,0 Hz) | 122,00 |
| **7'** | 7,46 (d, *J* =15,8 Hz) | 144,60 | 7,42 (d, *J* =15,9 Hz) | 145,66 |
| **8'** | 6,21 (d, *J* =15,8 Hz) | 114,67 | 6,16 (d, *J* =15,9 Hz) | 114,61 |
| **9'** | - | 166,02 | - | 166,24 |
| **8-$OCH_3$** | 3,51 (s) | 51,22 | 3,57 (s) | 52,37 |

**Tabela 3.** Compilação dos dados de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$, HSQC e HMBC de ***Pm*-1** (δ, DMSO-*d*$_6$, 400 e 100 MHz).

| C | HSQC | | HMBC | |
|---|---|---|---|---|
| | $\delta_H$ | $\delta_C$ | $^2J$ | $^3J$ |
| **1** | - | 72,03 | - | - |
| **2** | 1,64 (m, H-2a)<br>1,56 (m, H-2b) | 36,31 | - | - |
| **3** | 5,27 (d, *J* =7,0 Hz) | 70,44 | - | - |
| **4** | 3,66 (m) | 70,60 | - | - |
| **5** | 4,84 (s) | 68,96 | - | - |
| **6** | 1,64 (m, H-6a)<br>1,85 (m, H-6b) | 37,98 | - | - |
| **7** | - | 173,25 | - | - |
| **1'** | - | 125,75 | - | - |
| **2'** | 7,02 (s) | 114,93 | C-3' | - |
| **3'** | - | 148,27 | - | - |
| **4'** | - | 145,62 | - | - |
| **5'** | 6,75 (d, *J* =8,0 Hz) | 115,85 | C-4' | C-1' |
| **6'** | 6,97 (d, *J* =8,0 Hz) | 121,26 | - | - |
| **7'** | 7,46 (d, *J* =15,8 Hz) | 144,60 | C-1' | C-2', C-6' e C-9' |
| **8'** | 6,21 (d, *J* =15,8 Hz) | 114,67 | C-9' | C-1' |
| **9'** | - | 166,02 | - | - |
| **8-OCH$_3$** | 3,51 (s) | 51,21 | - | C-7 |

**Figura 26.** Espectro de RMN $^{1}H$ de *Pm*-1 (δ, DMSO-*d*$_6$, 400 MHz).

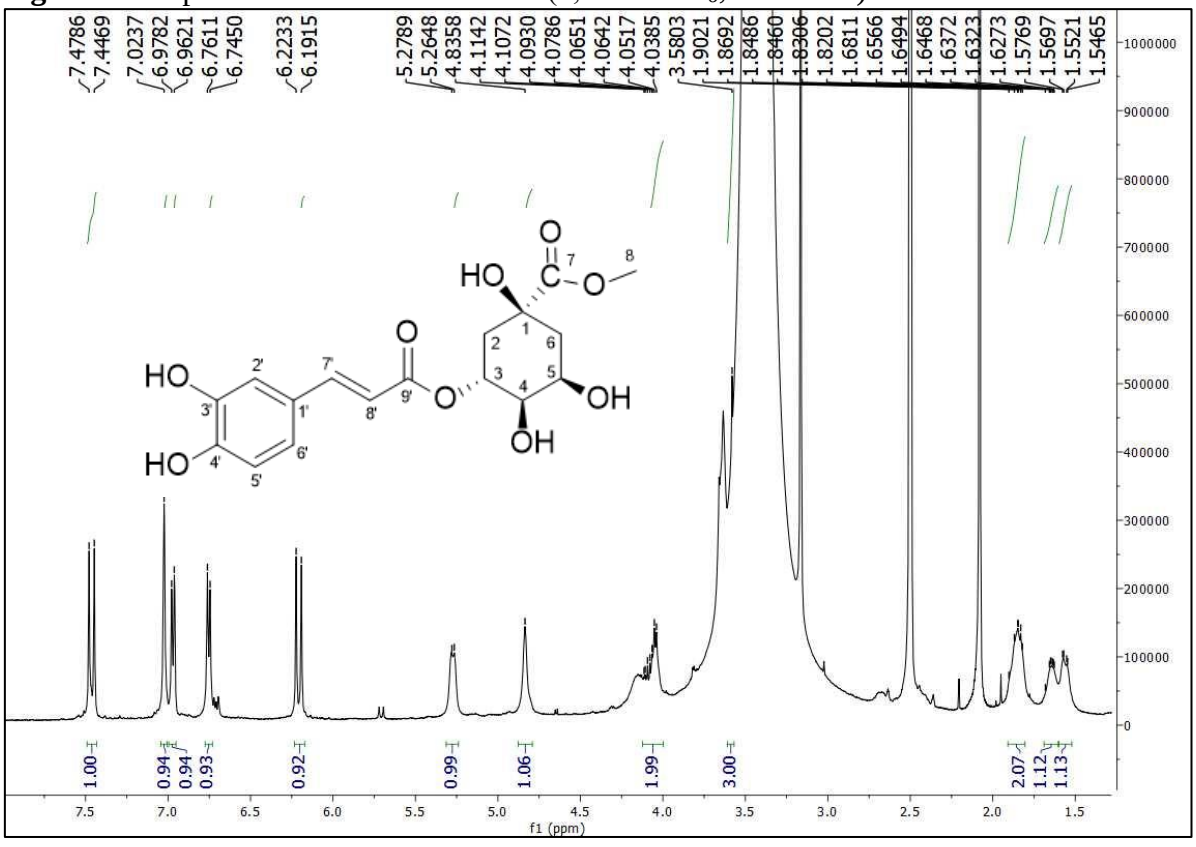


**Figura 27.** Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pm*-1 (δ, DMSO-$d_6$, 100 MHz).

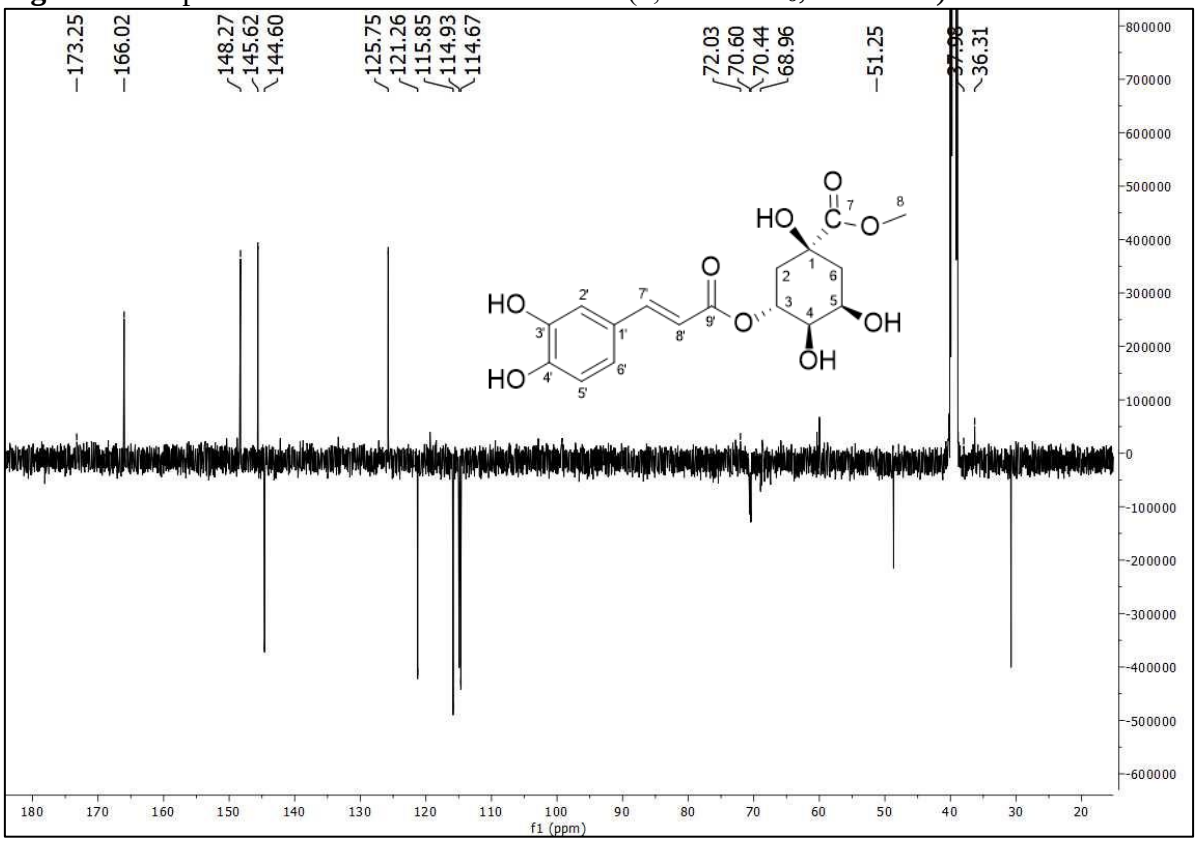



**Figura 28.** Espectro de RMN $^{1}$H/$^{13}$C-HSQC de *Pm*-1 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).

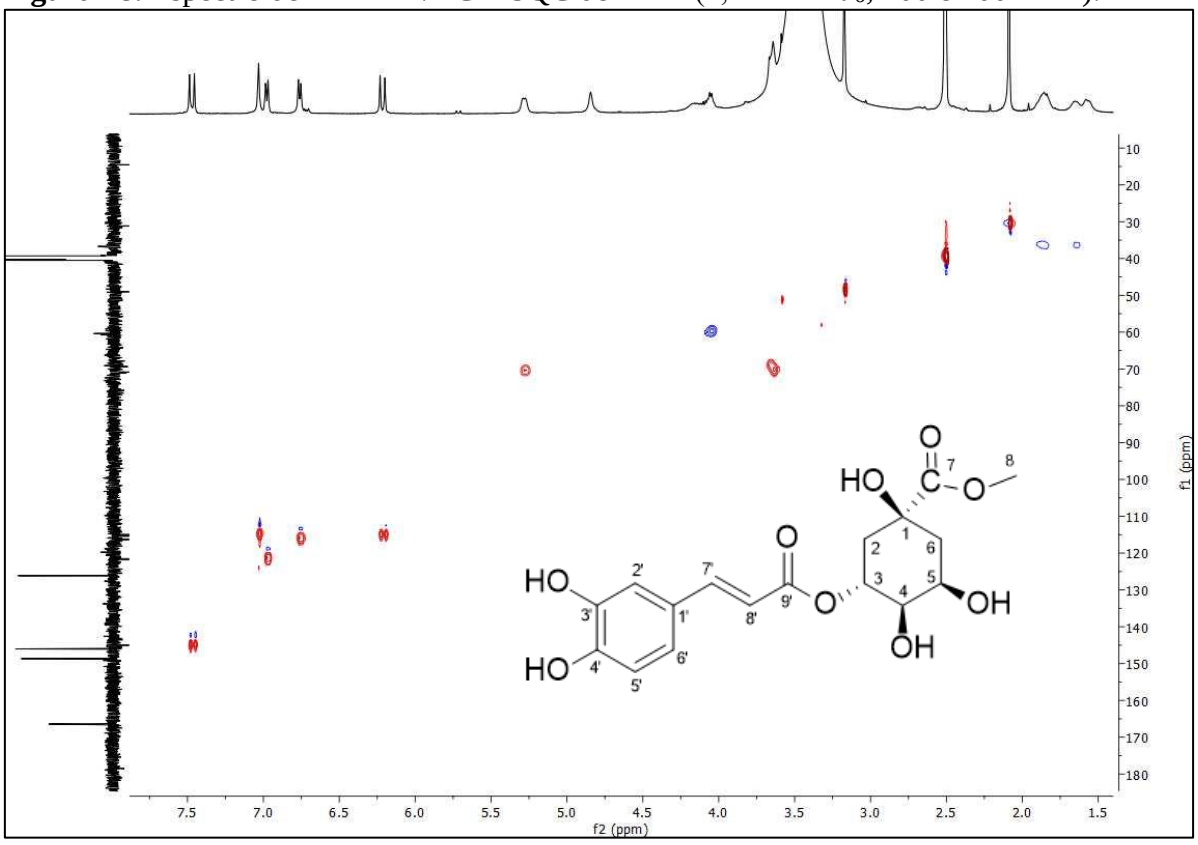
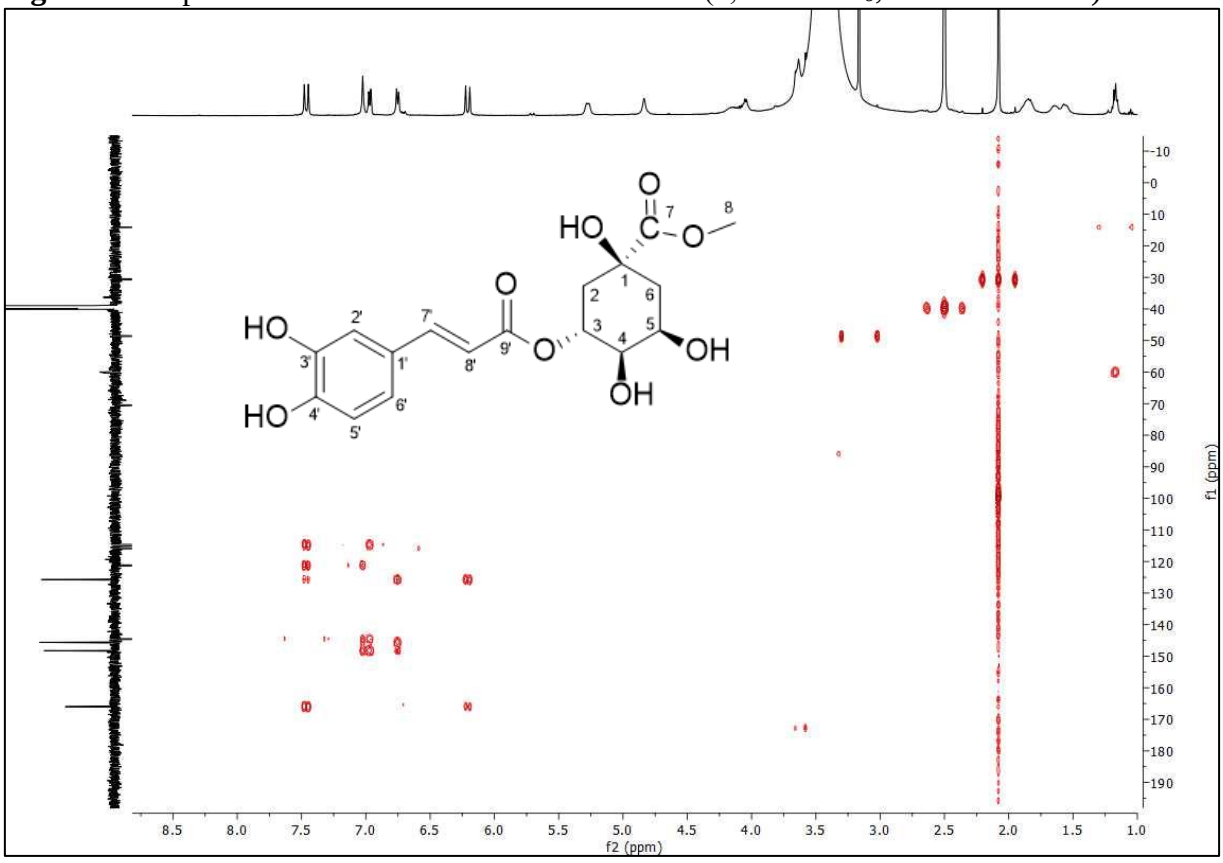


**Figura 29.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HMBC de *Pm*-1 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).




### 5.2.2 Determinação estrutural de *Pm*-2

A substância codificada como *Pm*-2 apresentou-se em forma de sólido acastanhado. Em seu cromatograma, apresenta-se como pico com o tempo de retenção de 28,318 minutos (Figura 24, pág. 87). Seu espectro de RMN $^{1}H$ foi obtido a 400 MHz em DMSO-$d_6$ (Figura 31, pág. 98). A análise do espectro e de suas expansões revelou um conjunto de absorções para três sinais na região de aromáticos, correspondentes a um sistema do tipo ABX de esqueleto fenólico. Os sinais em $\delta_H$ 7,02 (s), $\delta_H$ 6,75 (s) e $\delta_H$ 6,95 (s) foram atribuídos aos hidrogênios H-2', H-5' e H-6', respectivamente da unidade cafeoíla. A presença de dois dupletos acoplando em *trans* com sinais em $\delta_H$ 7,46 (d, $J$ =15,8 Hz) e $\delta_H$ 6,20 (d, $J$ =15,8 Hz) foram atribuídos aos hidrogênios olefínicos H-7' e H-8', respectivamente, ambos com uma integral de um hidrogênio cada (Figura 31, pág. 98) (JEONG et al., 2011).

Sinais para três hidrogênios oximetínicos, assim como em *Pm*-1 foram evidenciados com sinais em $\delta_H$ 4,06 (d, $J$ =6,8 Hz), $\delta_H$ 3,82 (d, $J$ =9,9 Hz) e $\delta_H$ 5,18 (d, $J$ =8,1 Hz), correspondentes aos hidrogênios H-4, H-5 e H-3, respectivamente (Figura

31, pág. 98) (WAN et al., 2017).

Sinais referentes a hidrogênios metilênicos na região entre $\delta_H$ 1,86 e $\delta_H$ 2,05 ppm (m) (Figura 31, pág. 97), condizentes com os hidrogênios H-2a/H-2b e H-6a/H-6b, sugerindo que *Pm*-2 também poderia se tratar de um derivado do ácido quínico (KUCZKOWIAK et al., 2014). Um dupleto em $\delta_H$ 3,82 ($J$ =9,9 Hz) integrando para dois hidrogênios e um tripleto em $\delta_H$ 1,19 ($J$ =7,1 Hz), integrando para três hidrogênios foram condizentes com os hidrogênios H-8 e H-9 na molécula, correspondendo a um radical etila ligado no grupo ácido (GE et al., 2018).

Ao analisar o espectro de RMN $^{13}C$ e suas expansões utilizando a técnica APT de *Pm*-2 obtido a 100 MHz em DMSO-$d_6$ (Figura 32, pág. 98), foi possível observar sinais condizentes à presença da unidade de cafeoíla que foi ratificada pela presença dos sinais em $\delta_C$ 148,6 e $\delta_C$ 145,7 atribuídos aos carbonos C-3' e C-4' desta unidade, além dos sinais em $\delta_C$ 126,0, $\delta_C$ 115,8, $\delta_C$ 114,8 e $\delta_C$ 121,2 foram atribuídos aos carbonos C-1', C-2', C-5' e C-6', respectivamente, do sistema aromático ABX (Figura 32, pág. 98) (LIU et al., 2013).

A presença da carbonila da unidade cafeoíla foi confirmada pela presença de um sinal em $\delta_C$ 166,1 atribuído ao carbono C-9'. Os sinais em $\delta_C$ 144,7 e $\delta_C$ 114,5 foram evidenciados e atribuídos aos carbonos C-7' e C-8', sendo o carbono C-7' mais desprotegido do que C-8' por influência do sistema carbonílico *α,β*-insaturado (Figura 32, pág. 98) (GE et al., 2018).

Os sinais em $\delta_C$ 72,8, $\delta_C$ 70,5, $\delta_C$ 70,2, $\delta_C$ 67,7, $\delta_C$ 38,5 e $\delta_C$ 34,9 foram atribuídos aos carbonos C-1, C-4, C-3, C-5, C-6 e C-2, respectivamente. Foi observado ainda, um sinal de carbonila de éster em $\delta_C$ 173,8, atribuído ao carbono C-7, e dois sinais em $\delta_C$ 60,0 e $\delta_C$ 14,0 correspondendo aos carbonos C-8 e C-9 da estrutura do derivado de ácido quínico (Figura 32, pág. 98) (WAN et al., 2017).

A estrutura do composto foi confirmada através das técnicas bidimensionais de HMQC e HMBC, onde estes apresentaram mapas de contorno que levou à confirmação estrutural da molécula proposta.

O espectro de correlação heteronuclear HSQC, apresentou um mapa de contorno mostrando correlações que permitiram atribuir os hidrogênios ligados diretamente aos seus respectivos carbonos. Observou-se correlações entre os sinais $\delta_H$ 7,02 (H-2') e $\delta_C$ 115,8 (C-2'), $\delta_H$ 6,95 (H-6') e $\delta_C$ 121,2 (C-6'), $\delta_H$ 6,75 (H-5') e $\delta_C$ 114,9 (C-5'), $\delta_H$ 7,46 (H-7') e $\delta_C$ 144,7 (C-7') e $\delta_H$ 6,20 (H-8') e $\delta_C$ 114,5 (C-8'), confirmaram a presença da

unidade cafeoíla. Correlações entre os sinais $\delta_H$ 4,03 (H-4) e $\delta_C$ 67,7 (C-4), $\delta_H$ 5,18 (H-3) e $\delta_C$ 70,2 (C-3), $\delta_H$ 4,06 (H-5) e $\delta_C$ 70,5 (C-5), $\delta_H$ 3,82 (H-8), correspondentes ao derivado de ácido quínico, e $\delta_C$ 60,1 (C-8), $\delta_H$ 1,19 (H-9) e $\delta_C$ 14,0 (C-9), confirmando a existência do radical etila ligado à estrutura (Figura 33, pág. 99; Tabela 5, pág. 97).

O espectro de correlação heteronuclear HMBC e suas expansões evidenciaram sinais que puderam confirmar a molécula de *Pm*-2, onde se observou-se correlações entre os sinais $\delta_H$ 7,46 (H-7') com C-6' e C-9' a $^3$J e com C-8' a $^2$J; $\delta_H$ 6,20 (H-8') com C-9' a $^3$J e com C-1' a $^2$J; $\delta_H$ 6,95 (H-6') com C-7' a $^3$J e com C-1' a $^2$J; $\delta_H$ 4,03 (H-8) com C-7 a $^3$J e com C-9 a $^2$J; $\delta_H$ 1,86 (H-6b) com C-4 a $^3$J; $\delta_H$ 2,05 (H-2a/H-6a) e $\delta_H$ 1,86 (H-6b) com C-7 a $^3$J e $\delta_H$ 1,18 (H-9) com C-8 a $^2$J (Figura 34, pág. 99; Tabela 5, pág. 97).

A posição da esterificação da unidade cafeoíla no carbono C-3 foi atribuída neste ponto por meio de comparações com os dados da literatura (GE et al., 2018).

A análise dos dados espectrais de RMN $^1$H e RMN $^{13}$C juntamente com comparações com os dados da literatura (Tabela 4, pág. 96) permitiu constatar que *Pm*-2 tratar-se-ia do isômero derivado do ácido 3-*O*-cafeoilquínico etil-éster (Figura 30, pág. 96), composto este isolado pela primeira vez no gênero *Pavonia*.

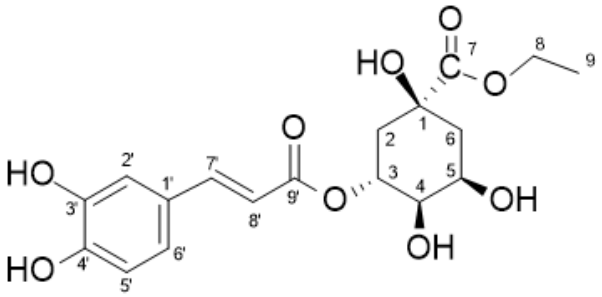



**Figura 30.** Ácido 3-*O*-cafeoilquínico etil-éster

**Tabela 4.** Dados comparativos de RMN $^1$H e $^{13}$C de ***Pm*-2** (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (ácido 3-*O*-cafeoilquínico metil-éster) (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz) (GE et al., 2018).

| **C** | ***Pm*-2** | | ***Mo*-1** | |
|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** |
| **1** | - | 72,81 | - | 74,14 |
| **2** | 2,05 (1H, m, H-2a)<br>1,95 (1H, m, H-2b) | 34,92 | 2,06 (1H, m, H-2a)<br>2,06 (1H, m, H-2b) | 36,34 |
| **3** | 5,18 (d, *J* =8,1 Hz, 1H) | 70,22 | 5,11 (d, *J* =3,6 Hz, 1H) | 70,62 |
| **4** | 4,06 (d, *J* =6,5 Hz, 1H) | 70,48 | 3,64 (s, 1H) | 71,34 |
| **5** | 3,82 (d, *J* =9,9 Hz, 1H) | 67,73 | 3,98 (s, 1H) | 68,31 |
| **6** | 2,05 (1H, m, H-6a)<br>1,86 (1H, m, H-6b) | 38,45 | 2,06 (1H, m, H-6a)<br>1,86 (1H, m, H-6b) | 37,60 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| **7** | - | 173,80 | - | 174,17 |
| **8** | 4,03 (q, *J* =6,8 Hz, 1H) | 60,07 | - | - |
| **9** | 1,19 (t, *J* =7,1 Hz, 3H) | 13,98 | - | - |
| **1'** | - | 126,04 | - | 126,15 |
| **2'** | 7,02 (s, 1H) | 115,79 | 7,06 (s, 1H) | 116,42 |
| **3'** | - | 148,55 | - | 148,86 |
| **4'** | - | 145,70 | - | 146,05 |
| **5'** | 6,75 (s, 1H) | 114,83 | 6,79 (d, *J* =8,0 Hz, 1H) | 115,01 |
| **6'** | 6,95 (s, 1H) | 121,21 | 6,95 (d, *J* =8,0 Hz, 1H) | 122,00 |
| **7'** | 7,46 (d, *J* =15,8 Hz, 1H) | 144,67 | 7,42 (d, *J* =15,9 Hz, 1H) | 145,66 |
| **8'** | 6,20 (d, *J* =15,8 Hz, 1H) | 114,53 | 6,16 (d, *J* =15,9 Hz, 1H) | 114,61 |
| **9'** | - | 166,10 | - | 166,24 |

**Tabela 5.** Compilação dos dados de RMN $^{1}$H e $^{13}$C, HSQC e HMBC de ***Pm*-2** (δ, DMSO-*d*$_6$, 400 e 100 MHz).

| **C** | **HSQC** | | **HMBC** | |
|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$^{2}$J** | **$^{3}$J** |
| **1** | - | 72,81 | - | - |
| **2** | 2,05 (1H, m, H-2a)<br>1,95 (1H, m, H-2b) | 34,92 | - | C-7 |
| **3** | 5,18 (d, *J* =8,1 Hz, 1H) | 70,22 | - | - |
| **4** | 4,06 (d, *J* =6,5 Hz, 1H) | 70,48 | - | - |
| **5** | 3,82 (d, *J* =9,9 Hz, 2H) | 67,73 | - | - |
| **6** | 2,05 (1H, m, H-6a)<br>1,86 (1H, m, H-6b) | 38,45 | - | C-4 e C-7 |
| **7** | - | 173,80 | - | - |
| **8** | 4,03 (d, *J* =6,8 Hz, 1H) | 60,07 | C-9 | C-7 |
| **9** | 1,19 (t, *J* =7,1 Hz, 3H) | 13,98 | C-8 | - |
| **1'** | - | 126,04 | - | - |
| **2'** | 7,02 (s, 1H) | 115,79 | - | - |
| **3'** | - | 148,55 | - | - |
| **4'** | - | 145,70 | - | - |
| **5'** | 6,75 (s, 1H) | 114,83 | - | - |
| **6'** | 6,95 (s, 1H) | 121,21 | C-1' | C-7' |
| **7'** | 7,46 (d, *J* =15,8 Hz, 1H) | 144,67 | C-8' | C-6', C-9' |
| **8'** | 6,20 (d, *J* =15,8 Hz, 1H) | 114,53 | C-1' | C-9' |
| **9'** | - | 166,10 | - | - |

**Figura 31.** Espectro de RMN $^{1}$H de *Pm*-2 (δ, DMSO-$d_6$, 400 MHz).

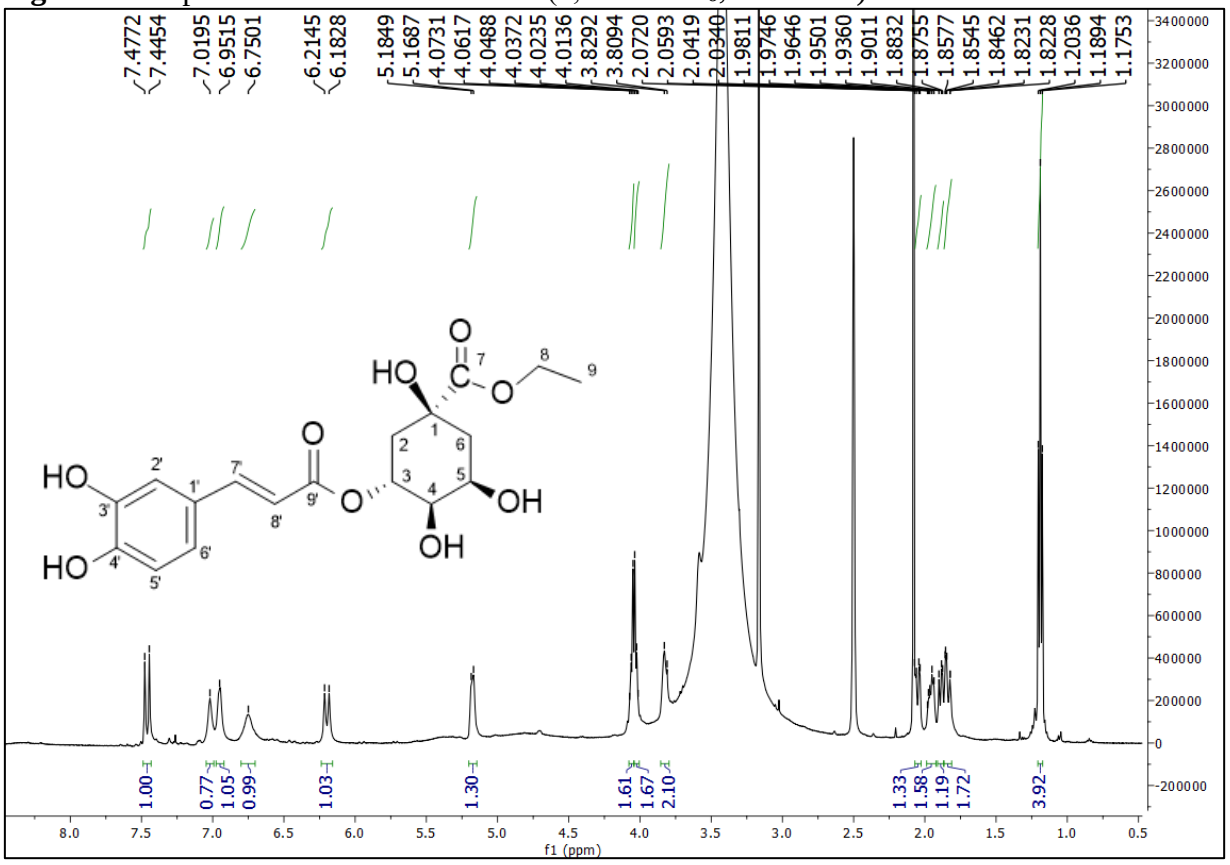



**Figura 32.** Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pm*-2 (δ, DMSO-$d_6$, 100 MHz).

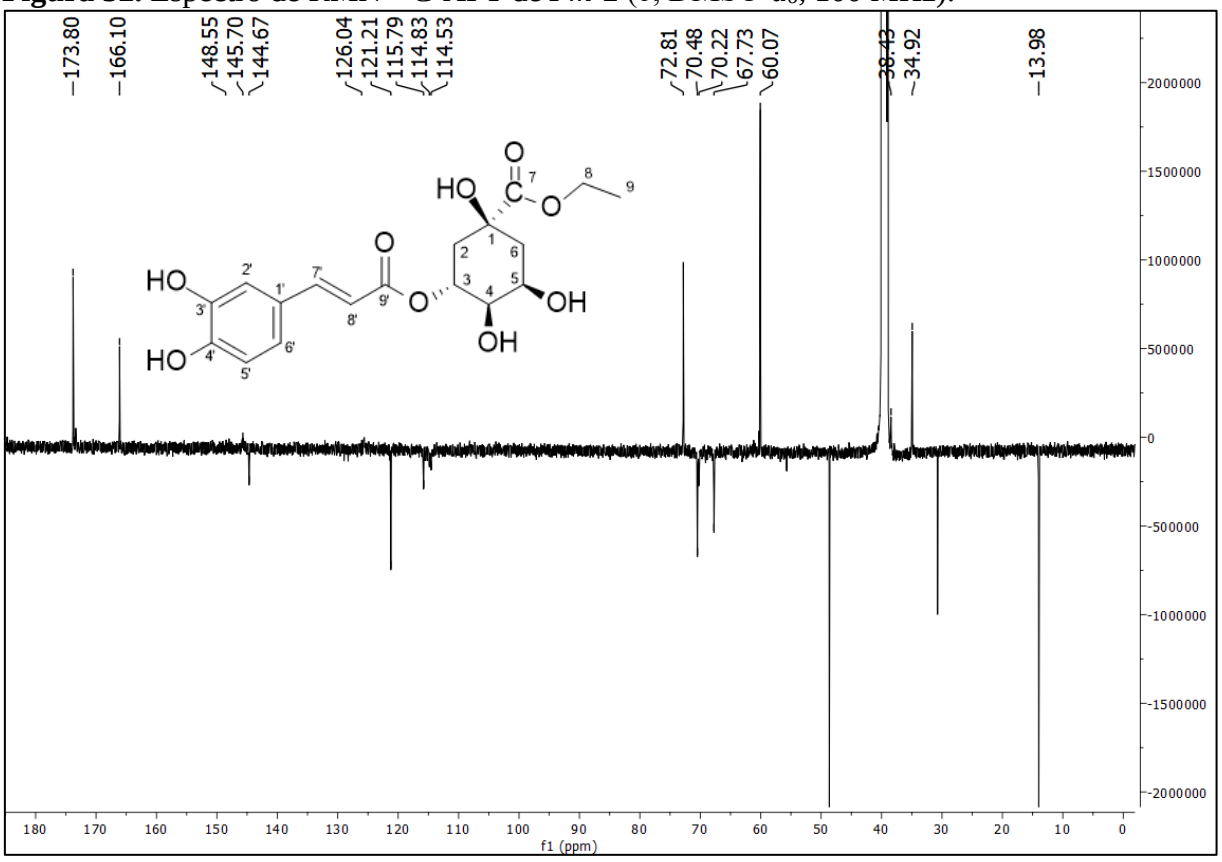


**Figura 33.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HSQC de *Pm*-2 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).

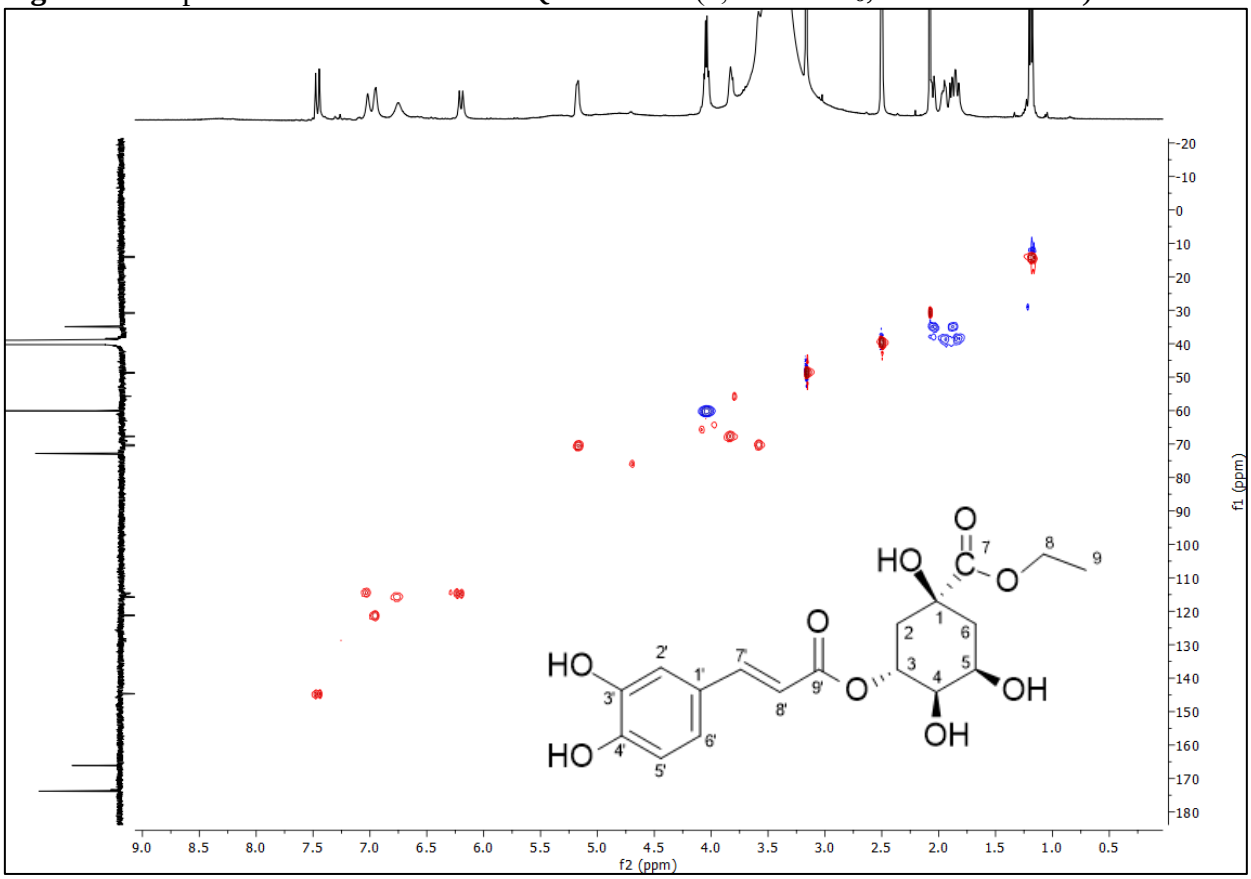
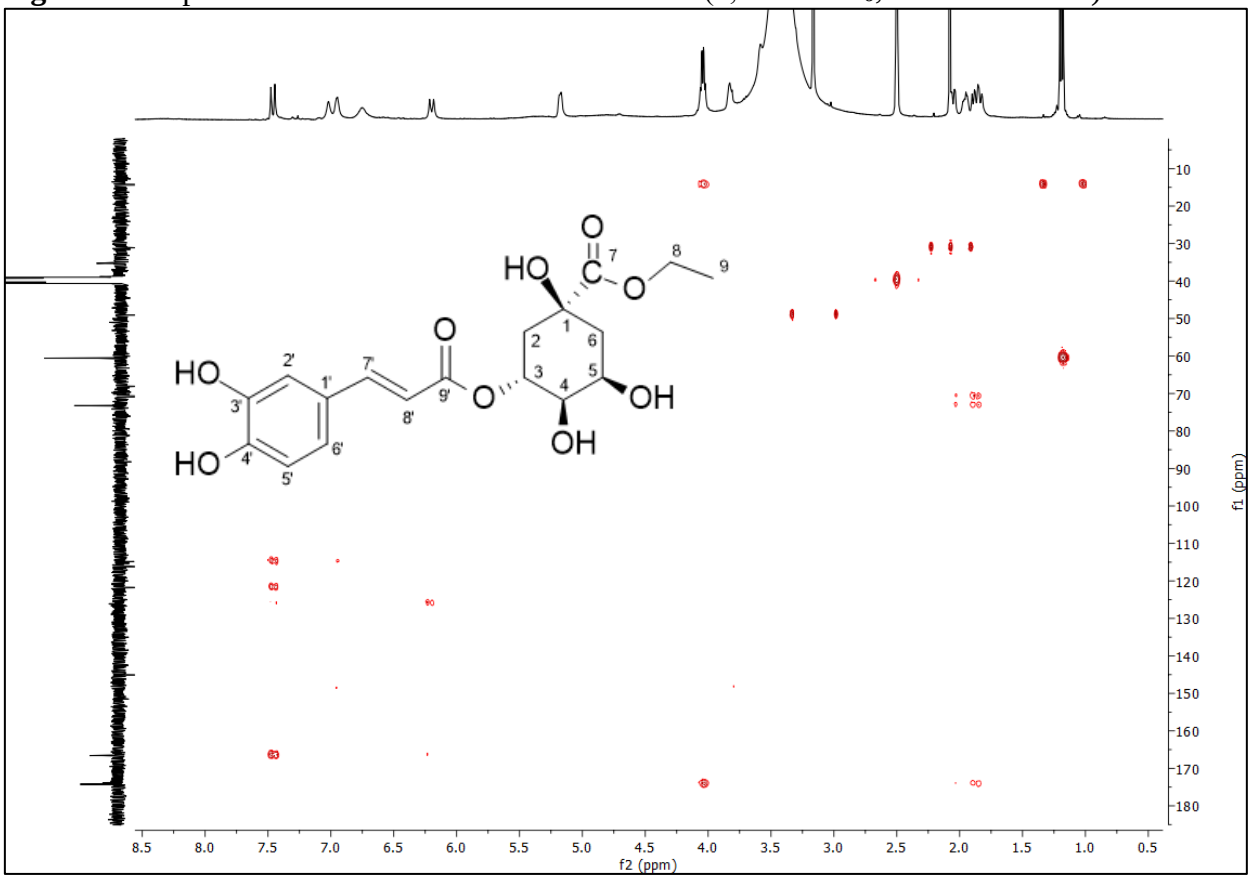



**Figura 34.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HMBC de *Pm*-2 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).



### 5.2.3 Determinação estrutural de *Pm*-3

A substância codificada como *Pm*-3 apresentou-se em forma de sólido acastanhado. Em seu cromatograma apresenta-se como o pico com o tempo de retenção de 50,011 minutos (Figura 24, pág. 87). Seu espectro de RMN $^{1}H$ foi obtido a 400 MHz em DMSO-$d_6$ (Figura 36, pág. 103). A análise do seu espectro e suas expansões evidenciaram absorções de sinais na região de aromáticos que também foram correspondentes a um sistema do tipo ABX. Os sinais em $\delta_H$ 7,04 (s), $\delta_H$ 6,76 (d, $J$ =8,4 Hz) e $\delta_H$ 6,99 (dd, $J$ =8,2 e 2,0 Hz) foram atribuídos aos hidrogênios H-2', H-5' e H-6', respectivamente da unidade cafeoíla. Dois dupletos acoplados em *trans* com sinais em $\delta_H$ 7,49 (d, $J$ =15,9 Hz) e $\delta_H$ 6,27 (d, $J$ =15,9 Hz) foram atribuídos aos hidrogênios olefínicos H-7' e H-8', respectivamente, ambos com uma integral de um hidrogênio cada (Figura 36, pág. 103) (JEONG et al., 2011).

Três hidrogênios oximetínicos, assim como em *Pm*-2 foram evidenciados com sinais em $\delta_H$ 3,98 (m), $\delta_H$ 4,70 (dd, $J$ =7,1 e 3,0 Hz) e $\delta_H$ 4,08 (m), correspondentes aos hidrogênios H-4, H-5 e H-3, respectivamente (Figura 36, pág. 103) (WAN et al., 2017).

Absorções referentes a hidrogênios metilênicos na região entre $\delta_H$ 1,80 e $\delta_H$ 2,06 ppm (m), condizentes com os hidrogênios H-2a/H-2b e H-6a/H-6b (Figura 36, pág. 103), sugerindo que *Pm*-3 também poderia se tratar de um derivado do ácido quínico (KUCZKOWIAK et al., 2014). Sinais para um radical etila também foi evidenciado com um dupleto em $\delta_H$ 4,05 (m) integrando para dois hidrogênios e um tripleto em $\delta_H$ 1,19 ($J$ =7,1 Hz) (Figura 36, pág. 102), integrando para três hidrogênios foram condizentes aos hidrogênios H-8 e H-9 na molécula (GE et al., 2018).

Ao analisar o espectro de RMN $^{13}C$ e suas expansões utilizando a técnica APT de *Pm*-3 obtido a 100 MHz em DMSO-$d_6$ (Figura 37, pág. 103), foi possível atribuir os sinais à presença da unidade de cafeoíla que foi ratificada pelos sinais em $\delta_C$ 145,5 e $\delta_C$ 148,3 atribuídos aos carbonos C-3' e C-4' desta unidade, além dos sinais em $\delta_C$ 125,5, $\delta_C$ 114,5, $\delta_C$ 115,7 e $\delta_C$ 121,2 foram atribuídos aos carbonos C-1', C-2', C-5' e C-6', respectivamente, do sistema aromático ABX (Figura 37, pág. 103) (LIU et al., 2013).

A presença da carbonila da unidade cafeoíla foi confirmada por um sinal em $\delta_C$ 166,2 atribuído ao carbono C-9'. Os sinais em $\delta_C$ 144,8 e $\delta_C$ 114,4 foram evidenciados e atribuídos aos carbonos C-7' e C-8' (Figura 37, pág. 103) (BAJKO et al., 2015).

Sinais em $\delta_C$ 73,6, $\delta_C$ 64,2, $\delta_C$ 65,6, $\delta_C$ 75,8, $\delta_C$ 37,8 e $\delta_C$ 37,4 foram atribuídos

aos carbonos C-1, C-4, C-3, C-5, C-6 e C-2, respectivamente. Um sinal de carbonila de éster em $\delta_C$ 173,2 foi atribuído ao carbono C-7, e dois sinais em $\delta_C$ 60,2 e $\delta_C$ 13,9 correspondendo aos carbonos C-8 e C-9 da estrutura do derivado de ácido quínico.

A estrutura do composto foi ainda confirmada através das técnicas bidimensionais de HMQC e HMBC, onde estes apresentaram mapas de contorno que levou à confirmação estrutural da molécula proposta.

O espectro de HSQC mostra a correlação entre o hidrogênio H-8' ($\delta_H$ 6,27) com seu respectivo carbono em C-8' ($\delta_C$ 114,4) e no espectro HMBC o próton H-8' está correlacionando com o carbono C-9' em 166,2. Além disso, o espectro de HSQC revela que o hidrogênio H-5 ($\delta_H$ 4,70) está ligado ao seu carbono C-5 em $\delta_C$ 75,8 (Figura 38, pág. 104; Tabela 7, pág. 102).

Uma correlação do próton H-4 ($\delta_H$ 3,98) é evidenciada ao apresentar correlação direta com o carbono C-4 ($\delta_C$ 64,2) e em longa distância com o carbono C-2 ($\delta_C$ 37,4). Observou-se ainda uma correlação o hidrogênio H-6b ($\delta_H$ 1,80) com seu carbono C-6 ($\delta_C$ 37,8) e uma correlação a longa distância com o carbono C-5 ($\delta_C$ 75,8) (Figura 39, pág. 104; Tabela 7, pág. 102) (BAJKO et al., 2015).

A posição da esterificação da unidade cafeoíla no carbono C-5 foi atribuída neste ponto por meio de comparações com os dados da literatura e através da análise de HMBC, onde há uma correlação do hidrogênio H-5 ($\delta_H$ 4,70) com o carbono C-9' ($\delta_C$ 166,2) da carbonila da unidade de cafeoíla (Figura 35, pág. 101; Tabela 6, pág. 102) (BAJKO et al., 2015).

A análise dos dados espectrais de RMN $^{1}H$ e RMN $^{13}C$ juntamente com comparações com os dados da literatura (Tabela 6, pág. 102) permitiu constatar que *Pm*-3 tratar-se-ia do isômero derivado do ácido 5-*O*-cafeoilquínico etil-éster (Figura 35, pág. 101), composto este isolado pela primeira vez no gênero *Pavonia*.

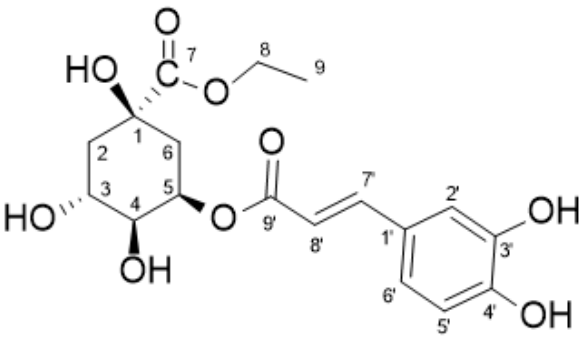



**Figura 35.** Ácido 5-*O*-cafeoilquínico etil-éster

**Tabela 6.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pm*-3** (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (ácido 5-*O*-cafeoilquínico) (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz) (BAJKO et al., 2015).

| C | ***Pm*-3** | | ***Mo*-1** | |
|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** |
| **1** | - | 73,60 | - | 73,60 |
| **2** | 2,06 (2H, m, H-2a)<br>1,92 (1H, m, H-2b) | 37,38 | 2,03 (1H, dd, *J* =13,1, 2,9 Hz, H-2a)<br>2,01 (1H, dd, *J* =13,3, 6,8 Hz, H-6a) | 37,30 |
| **3** | 4,08 (1H, m) | 65,58 | 3,94 (1H, ddd, 7,7, 2,9, 2,9 Hz) | 68,20 |
| **4** | 3,98 (1H, m) | 64,21 | 3,58 (1H, dd, *J* =6,9, 2,9 Hz) | 70,50 |
| **5** | 4,70 (dd, *J* =7,1, 3,0 Hz, 1H) | 75,81 | 5,08 (1H, ddd, *J* =6,9, 6,8, 4,2 Hz | 71,00 |
| **6** | 2,06 (2H, m, H-6a)<br>1,80 (1H, m, H-6b) | 37,75 | 1,80 (1H, dd, *J* =13,1, 7,7 Hz, H-2b)<br>1,96 (1H, dd, *J* =13,3, 4,2 Hz, H-6b) | 36,40 |
| **7** | - | 173,23 | - | 175,00 |
| **8** | 4,05 (2H, m) | 60,17 | - | - |
| **9** | 1,19 (3H, t, *J* =7,1 Hz) | 13,86 | - | - |
| **1'** | - | 125,48 | - | 125,70 |
| **2'** | 7,04 (1H, s) | 114,54 | 7,04 (d, *J* =2,0 Hz, 1H) | 114,90 |
| **3'** | - | 145,53 | - | 145,60 |
| **4'** | - | 148,30 | - | 148,40 |
| **5'** | 6,76 (1H, d, *J* =8,4 Hz) | 115,71 | 6,77 (1H, d, *J* =8,2 Hz) | 115,90 |
| **6'** | 6,99 (1H, dd, *J* =8,2, 2,0 Hz) | 121,23 | 6,98 (1H, dd, *J* =8,2, 2,0 Hz) | 121,50 |
| **7'** | 7,49 (1H, d, *J* =15,9 Hz) | 144,82 | 7,43 (1H, d, *J* =15,9 Hz) | 145,00 |
| **8'** | 6,27 (1H, d, *J* =15,9 Hz) | 114,43 | 6,16 (1H, d, *J* =15,9 Hz) | 114,40 |
| **9'** | - | 166,21 | - | 165,90 |

**Tabela 7.** Compilação dos dados de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$, HSQC e HMBC de ***Pm*-3** (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).

| C | **HSQC** | | **HMBC** | |
|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$^{2}J$** | **$^{3}J$** |
| **1** | - | 73,60 | - | - |
| **2** | 2,06 (2H, m, H-2a)<br>1,92 (1H, m, H-2b) | 37,38 | - | - |
| **3** | 4,08 (1H, m) | 65,58 | C-4 | - |
| **4** | 3,98 (1H, m) | 64,21 | - | C-2 |
| **5** | 4,70 (dd, *J* =7,1, 3,0 Hz, 1H) | 75,81 | C-4, C-6 | C-9' |
| **6** | 2,06 (2H, m, H-6a)<br>1,80 (1H, m, H-6b) | 37,75 | C-5 | C-4,C-7 |
| **7** | - | 173,23 | - | - |
| **8** | 4,05 (2H, m) | 60,17 | C-9 | C-7 |
| **9** | 1,19 (3H, t, *J* =7,1 Hz) | 13,86 | C-8 | - |
| **1'** | - | 125,48 | - | - |
| **2'** | 7,04 (1H, s) | 114,54 | - | C-4', C-6', C-7' |
| **3'** | - | 145,53 | - | - |
| **4'** | - | 148,30 | - | - |
| **5'** | 6,76 (1H, d, *J* =8,4 Hz) | 115,71 | - | C-1' |
| **6'** | 6,99 (1H, dd, *J* =8,2, 2,0 Hz) | 121,23 | - | C-2', C-4' |
| **7'** | 7,49 (1H, d, *J* =15,9 Hz) | 144,82 | C-1' | C-2', C-6', C-9' |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| **8'** | 6,27 (1H, d, *J* =15,9 Hz) | 114,43 | C-9' | C-1' |
| **9'** | - | 166,21 | - | - |

**Figura 36.** Espectro de RMN $^{1}$H de *Pm*-3 (δ, DMSO-$d_6$, 400 MHz).

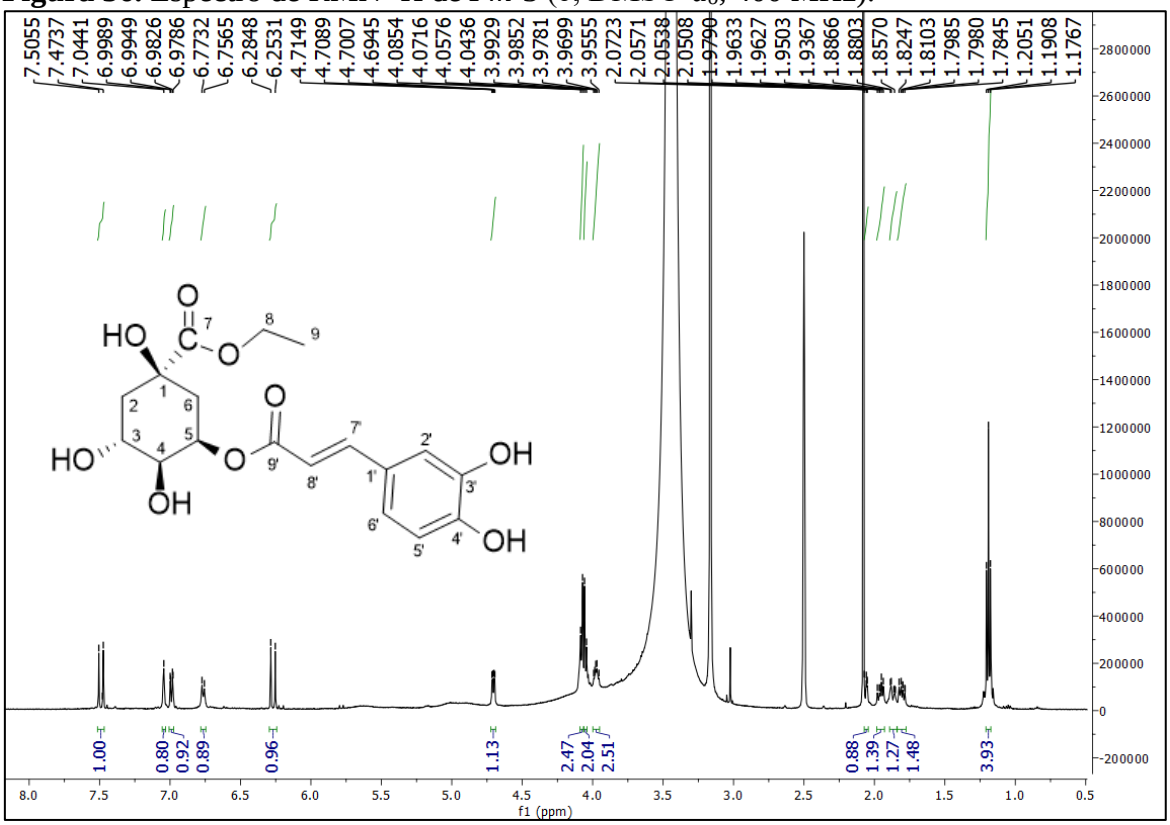



**Figura 37.** Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pm*-3 (δ, DMSO-$d_6$, 100 MHz).

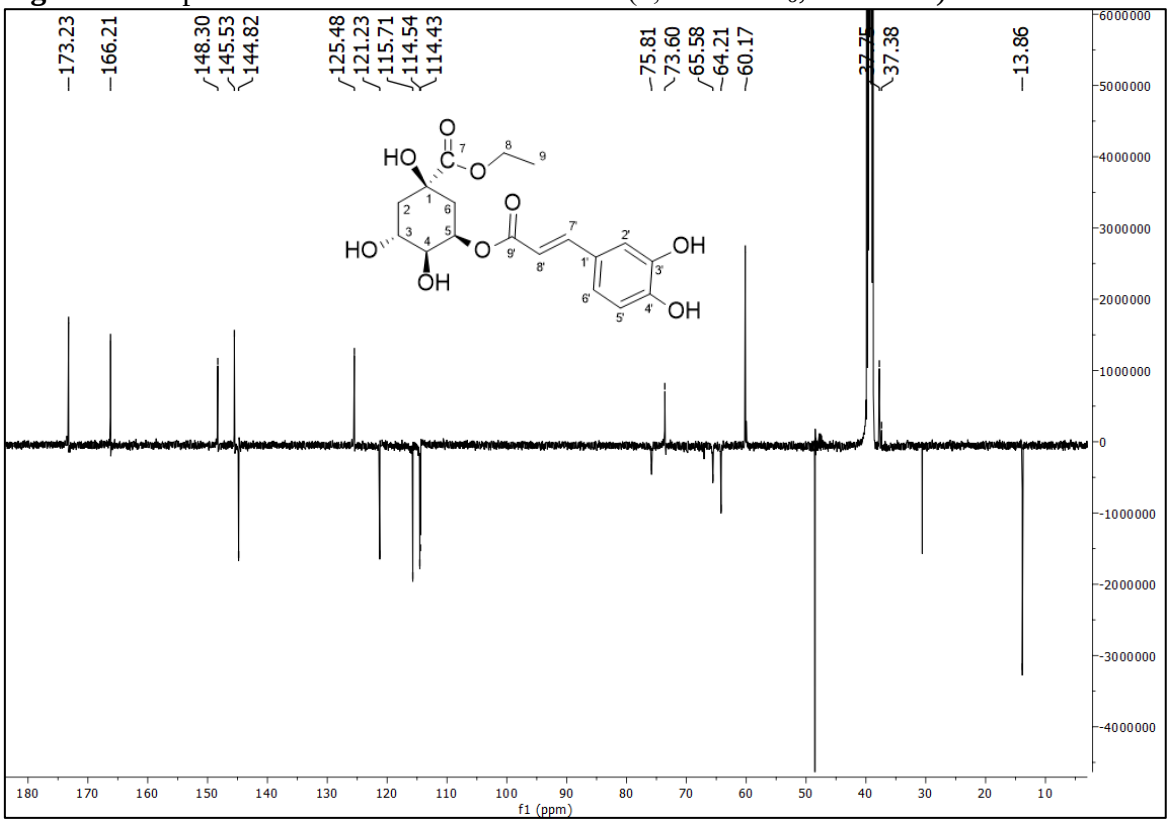


**Figura 38.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HSQC de *Pm*-3 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).

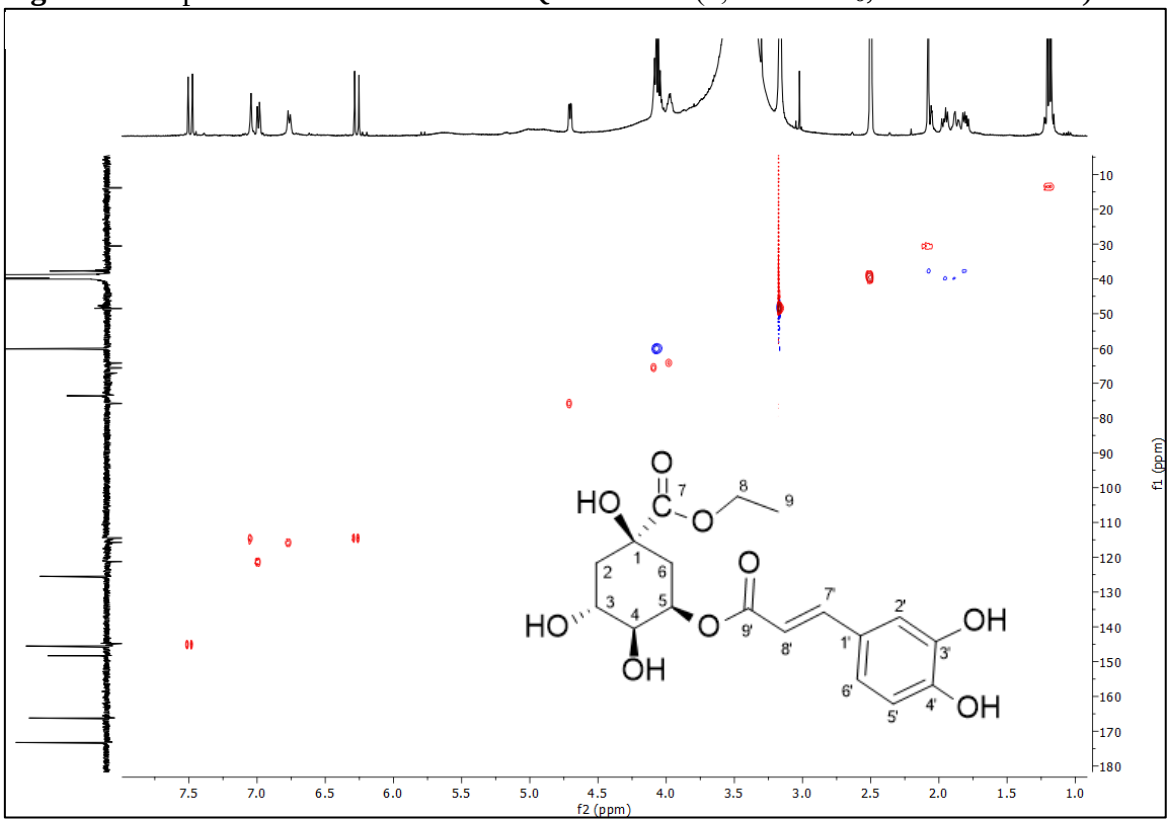
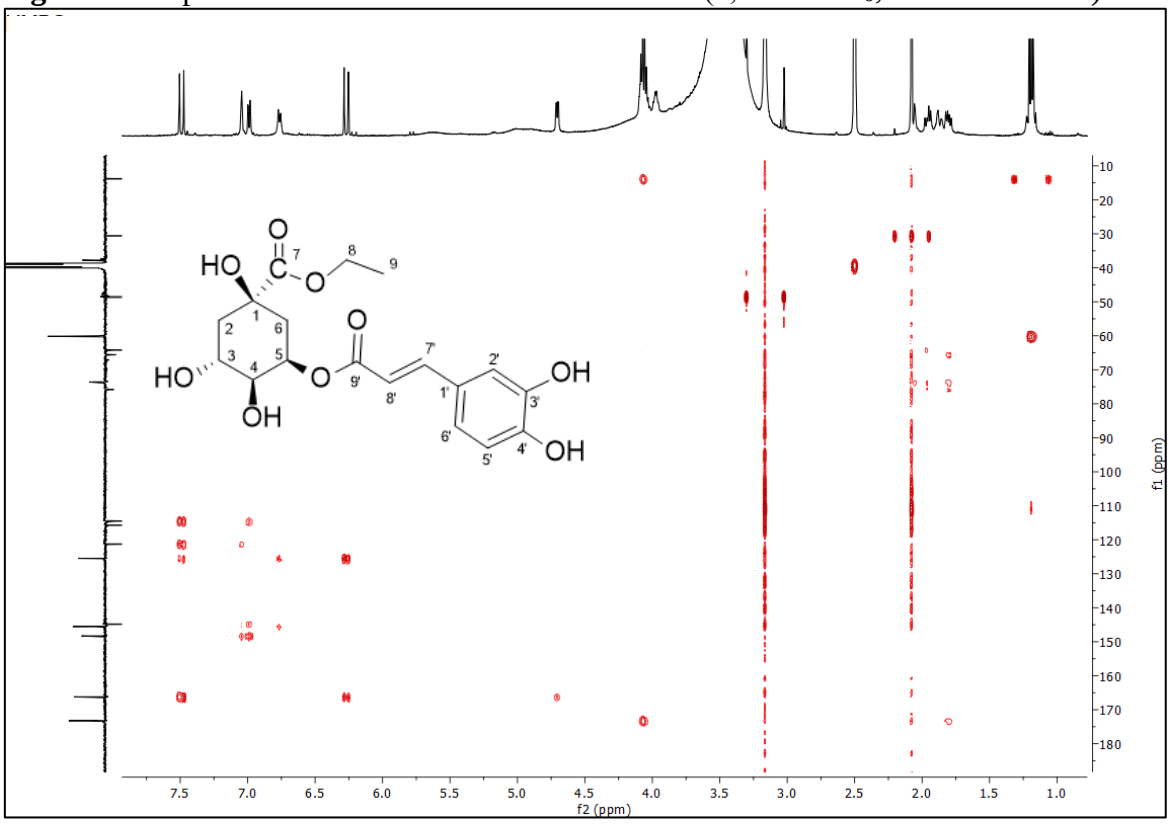



**Figura 39.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HMBC de *Pm*-3 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).



### 5.2.4 Determinação estrutural de *Pm*-4

A substância codificada como *Pm*-4 apresentou-se em forma de sólido acastanhado. Em seu cromatograma apresenta-se como o pico com o tempo de retenção de 70,945 minutos (Figura 24, pág. 87). Seu espectro e suas expansões de RMN $^{1}H$ foram obtidos a 400 MHz em DMSO-$d_6$ (Figura 41, pág. 108) revelaram absorções para três sinais na região de aromáticos, correspondentes a um sistema do tipo ABX.

Os sinais em $\delta_H$ 7,01 (s), $\delta_H$ 6,76 (d, $J$ =8,2 Hz) e $\delta_H$ 6,95 (dd, $J$ =8,1 e 1,7 Hz) foram atribuídos aos hidrogênios H-2', H-5' e H-6', respectivamente da unidade cafeoíla. Dois dupletos acoplando em *trans* com sinais em $\delta_H$ 7,38 (d, $J$ =15,9 Hz) e $\delta_H$ 6,10 (d, $J$ =15,9 Hz) foram atribuídos aos hidrogênios olefínicos H-7' e H-8', respectivamente, ambos com uma integral de um hidrogênio cada (Figura 41, pág. 108) (JEONG et al., 2011).

Sinais condizentes com três hidrogênios oximetínicos, assim como em *Pm*-1, *Pm*-2 e *Pm*-3 evidenciados em $\delta_H$ 5,01 (q, $J$ =5,5 Hz), $\delta_H$ 3,88 (m) e $\delta_H$ 3,57 (dd, $J$ =5,5 e 2,6 Hz), foram atribuídos aos hidrogênios H-4, H-5 e H-3, respectivamente (Figura 41, pág. 108) (WAN et al., 2017).

Absorções na região entre $\delta_H$ 1,76 e $\delta_H$ 2,12 ppm (m), condizentes aos hidrogênios metilênicos H-2a/H2b e H-6a/H-6b (Figura 41, pág. 108), sugerindo que *Pm*-4 também poderia se tratar de um derivado do ácido quínico (KUCZKOWIAK et al., 2014). Um dupleto em $\delta_H$ 3,99 (m) integrando para dois hidrogênios metilênicos e um tripleto em $\delta_H$ 1,12 ($J$ =7,1 Hz) (Figura 41, pág. 108), integrando para três hidrogênios foram condizentes com os hidrogênios H-8 e H-9 na molécula, correspondendo a um radical etila ligado na estrutura (GE et al., 2018).

Ao analisar o espectro de RMN $^{13}C$ e suas expansões utilizando a técnica APT de *Pm*-4 obtido a 100 MHz em DMSO-$d_6$ (Figura 42, pág. 109), foi possível observar sinais compatíveis com a presença da unidade de cafeoíla que foi ratificada pela presença dos sinais em $\delta_C$ 148,6 e $\delta_C$ 145,7 atribuídos aos carbonos C-3' e C-4' desta unidade, além dos sinais em $\delta_C$ 125,4, $\delta_C$ 115,9, $\delta_C$ 114,6 e $\delta_C$ 121,4 foram atribuídos aos carbonos C-1', C-2', C-5' e C-6', respectivamente, do sistema aromático ABX (Figura 42, pág. 109) (LIU et al., 2013).

A presença da carbonila da unidade cafeoíla foi confirmada por um sinal em $\delta_C$ 165,5 atribuído ao carbono C-9'. Os sinais em $\delta_C$ 145,1 e $\delta_C$ 113,9 foram evidenciados e

atribuídos aos carbonos C-7’ e C-8’ (Figura 42, pág. 109) (BAJKO et al., 2015).

Sinais em $\delta_C$ 73,1, $\delta_C$ 71,1, $\delta_C$ 67,1, $\delta_C$ 69,5, $\delta_C$ 37,2 e $\delta_C$ 35,2 foram atribuídos aos carbonos C-1, C-4, C-3, C-5, C-6 e C-2, respectivamente. Foi observado ainda, um sinal de carbonila de éster em $\delta_C$ 173,1, atribuído ao carbono C-7, e dois sinais em $\delta_C$ 60,3 e $\delta_C$ 13,8 correspondendo aos carbonos C-8 e C-9 da estrutura do derivado de ácido quínico (Figura 42, pág. 109) (WAN et al., 2017).

A estrutura do composto também foi confirmada através das técnicas bidimensionais de HMQC e HMBC, nas quais estes apresentaram mapas de contorno que levaram à confirmação estrutural da molécula proposta.

O espectro de correlação heteronuclear HSQC, apresentou correlações diretas entre os sinais $\delta_H$ 7,01 (H-2’) e $\delta_C$ 115,9 (C-2’), $\delta_H$ 6,95 (H-6’) e $\delta_C$ 121,4 (C-6’), $\delta_H$ 6,76 (H-5’) e $\delta_C$ 114,6 (C-5’), $\delta_H$ 7,38 (H-7’) e $\delta_C$ 145,1 (C-7’) e $\delta_H$ 6,10 (H-8’) e $\delta_C$ 113,9 (C-8’), confirmaram a presença da unidade cafeoíla. Correlações entre os sinais $\delta_H$ 5,01 (H-4) e $\delta_C$ 71,1 (C-4), $\delta_H$ 3,57 (H-3) e $\delta_C$ 67,1 (C-3), $\delta_H$ 3,88 (H-5) e $\delta_C$ 69,5 (C-5), correspondentes ao derivado de ácido quínico e $\delta_H$ 3,99 (H-8) e $\delta_C$ 60,3 (C-8), $\delta_H$ 1,76 (H-9) e $\delta_C$ 13,8 (C-9), confirmando a existência do radical etila ligado a estrutura (Figura 43, pág. 109; Tabela 9, pág. 108).

O espectro de correlação heteronuclear HMBC e suas expansões evidenciaram sinais que puderam confirmar a molécula de *Pm*-4, onde se observou-se correlações entre os sinais $\delta_H$ 7, (H-7’) com C-6’ e C-9’ a $^3$J e com C-8’ a $^2$J; $\delta_H$ 6,10 (H-8’) com C-1’ a $^3$J e com C-9’ a $^2$J; $\delta_H$ 6,95 (H-6’) com C-5’ a $^2$J; $\delta_H$ 7,01 (H-2’) com C-6’ a $^3$J e com C-3’ a $^2$J; $\delta_H$ 1,76 (H-6b) e $\delta_H$ 1,92 (H-2b) com C-1 a $^2$J e $\delta_H$ 1,12 (H-9) com C-8 a $^2$J (Figura 44, pág. 110; Tabela 9, pág. 108).

A posição da esterificação da unidade cafeoíla no carbono C-4 foi atribuída neste ponto por meio de comparações com os dados da literatura (GE et al., 2018) e através da análise de HMBC onde há uma correlação do hidrogênio H-4 ($\delta_H$ 5,01) com o carbono C-9’ ($\delta_C$ 165,5) da carbonila da unidade de cafeoíla (Figura 44, pág. 110; Tabela 9, pág. 108).

A análise dos dados espectrais de RMN $^1$H e RMN $^{13}$C juntamente com comparações com os dados da literatura (Tabela 8, pág. 107) permitiu constatar que *Pm*-4 tratar-se-ia do isômero derivado do ácido 4-*O*-cafeoilquínico etil-éster (Figura 40, pág. 107), composto este isolado pela primeira vez no gênero *Pavonia*.

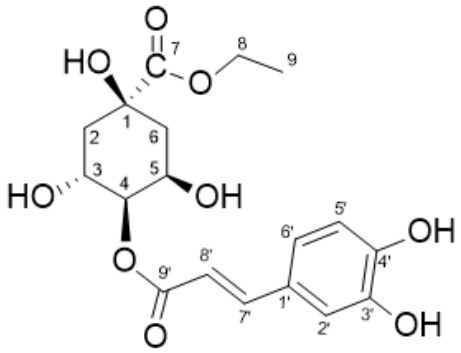


**Figura 40.** Ácido 4-*O*-cafeoilquínico etil-éster

**Tabela 8.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pm*-4** (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (ácido 4-*O*-cafeoilquínico metil-éster) (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz) (GE et al., 2018).

| C | ***Pm*-4** | | ***Mo*-1** | |
|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** |
| **1** | - | 73,12 | - | 73,08 |
| **2** | 2,12 (2H, m, H-2a)<br>1,92 (1H, m, H-2b) | 35,19 | 2,11 (2H, m, H-2a)<br>1,93 (1H, m, H-2b) | 35,16 |
| **3** | 3,57 (1H, dd, *J* =5,5, 2,6 Hz) | 67,05 | 3,58 (1H, m) | 67,00 |
| **4** | 5,01 (1H, q, *J* =5,5 Hz) | 71,10 | 5,02 (1H, d, *J* =3,7 Hz) | 71,04 |
| **5** | 3,88 (1H, m) | 69,53 | 3,89 (1H, m) | 69,50 |
| **6** | 2,12 (2H, m, H-6a)<br>1,76 (1H, m, H-6b) | 37,20 | 2,11 (2H, m, H-6a)<br>1,77 (2H, m, H-6b) | 37,16 |
| **7** | - | 173,12 | - | 173,06 |
| **8** | 3,99 (2H, m) | 60,34 | 4,00 (2H, m) | 60,27 |
| **9** | 1,12 (3H, t, *J* =7,1 Hz) | 13,84 | 1,12 (3H, t, *J* =7,1 Hz) | 13,79 |
| **1'** | - | 125,37 | - | 125,37 |
| **2'** | 7,01 (1H, s) | 115,89 | 7,02 (1H, s) | 115,84 |
| **3'** | - | 148,62 | - | 148,47 |
| **4'** | - | 145,71 | - | 145,62 |
| **5'** | 6,76 (1H, d, *J* =8,2 Hz) | 114,55 | 6,77 (1H, d, *J* = 8,0 Hz) | 114,55 |
| **6'** | 6,95 (1H, dd, *J* =8,1, 1,7 Hz) | 121,38 | 6,96 (1H, d, *J* = 8,0 Hz) | 121,28 |
| **7'** | 7,38 (1H, d, *J* =15,9 Hz) | 145,13 | 7,39 (1H, d, *J* = 15,9 Hz) | 145,04 |
| **8'** | 6,10 (1H, d, *J* =15,9 Hz) | 113,85 | 6,11 (1H, d, *J* = 15,9 Hz) | 113,85 |
| **9'** | - | 165,48 | - | 165,40 |

**Tabela 9.** Compilação dos dados de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$, HSQC e HMBC de ***Pm*-4** (δ, DMSO-*d*$_6$, 400 e 100 MHz).

| C | HSQC | | HMBC | |
|---|---|---|---|---|
| | $\delta_H$ | $\delta_C$ | $^2J$ | $^3J$ |
| **1** | - | 73,12 | - | - |
| **2** | 2,12 (2H, m, H-2a)<br>1,92 (1H, m, H-2b) | 35,19 | C-1 | C-7 |
| **3** | 3,57 (1H, dd, *J* =5,5, 2,6 Hz) | 67,05 | - | - |
| **4** | 5,01 (1H, q, *J* =5,5 Hz) | 71,10 | - | C-9’ |
| **5** | 3,88 (1H, m) | 69,53 | - | C-1 |
| **6** | 2,12 (2H, m, H-6a)<br>1,76 (1H, m, H-6b) | 37,20 | C-1 | C-7 |
| **7** | - | 173,12 | - | - |
| **8** | 3,99 (2H, m) | 60,34 | C-9 | - |
| **9** | 1,12 (3H, t, *J* =7,1 Hz) | 13,84 | C-8 | - |
| **1’** | - | 125,37 | - | - |
| **2’** | 7,01 (1H, s) | 115,89 | C-3’ | C-6’ |
| **3’** | - | 148,62 | - | - |
| **4’** | - | 145,71 | - | - |
| **5’** | 6,76 (1H, d, *J* =8,2 Hz) | 114,55 | - | C-1’, C-3’ |
| **6’** | 6,95 (1H, dd, *J* =8,1, 1,7 Hz) | 121,38 | C-5’ | - |
| **7’** | 7,38 (1H, d, *J* =15,9 Hz) | 145,13 | C-8’ | C-6’ e C-9’ |
| **8’** | 6,10 (1H, d, *J* =15,9 Hz) | 113,85 | C-9’ | C-1’ |
| **9’** | - | 165,48 | - | - |

**Figura 41.** Espectro de RMN $^{1}H$ de *Pm*-4 (δ, DMSO-*d*$_6$, 400 MHz).

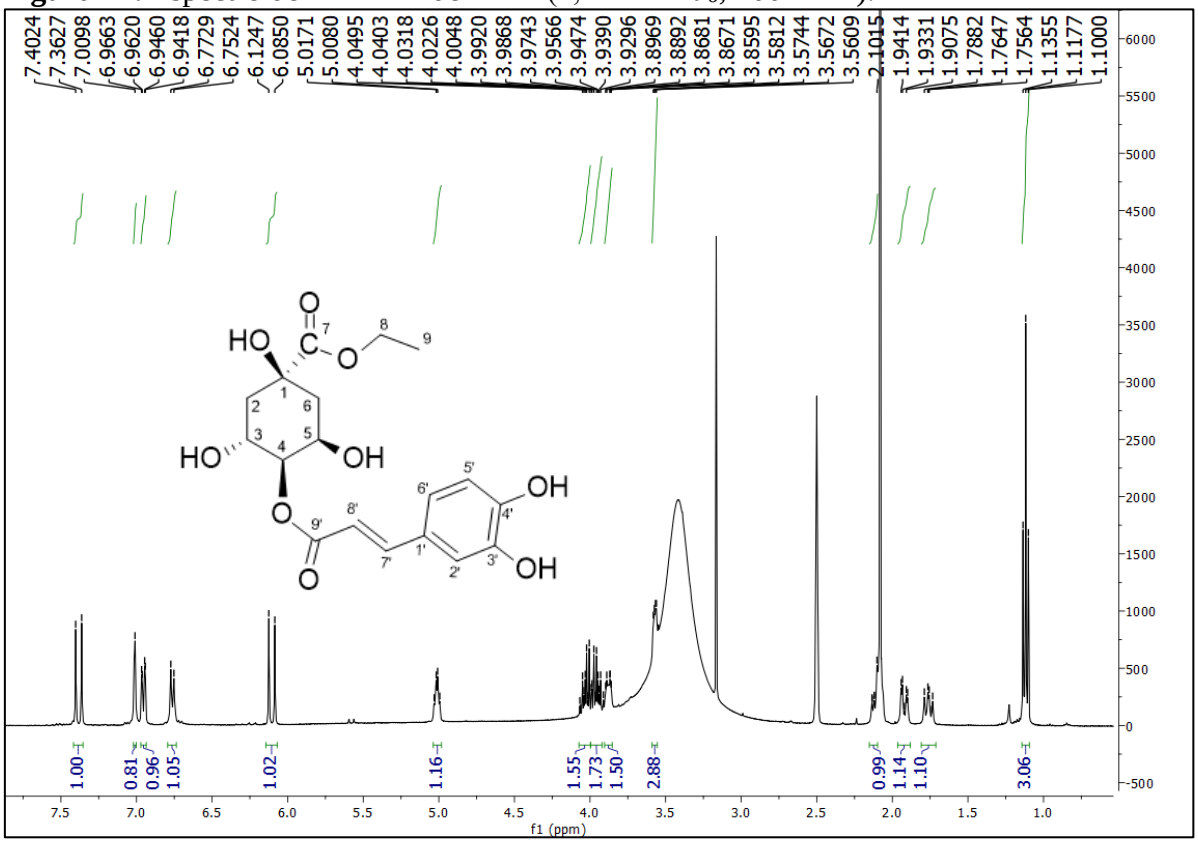


**Figura 42.** Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pm*-4 (δ, DMSO-$d_6$, 100 MHz).

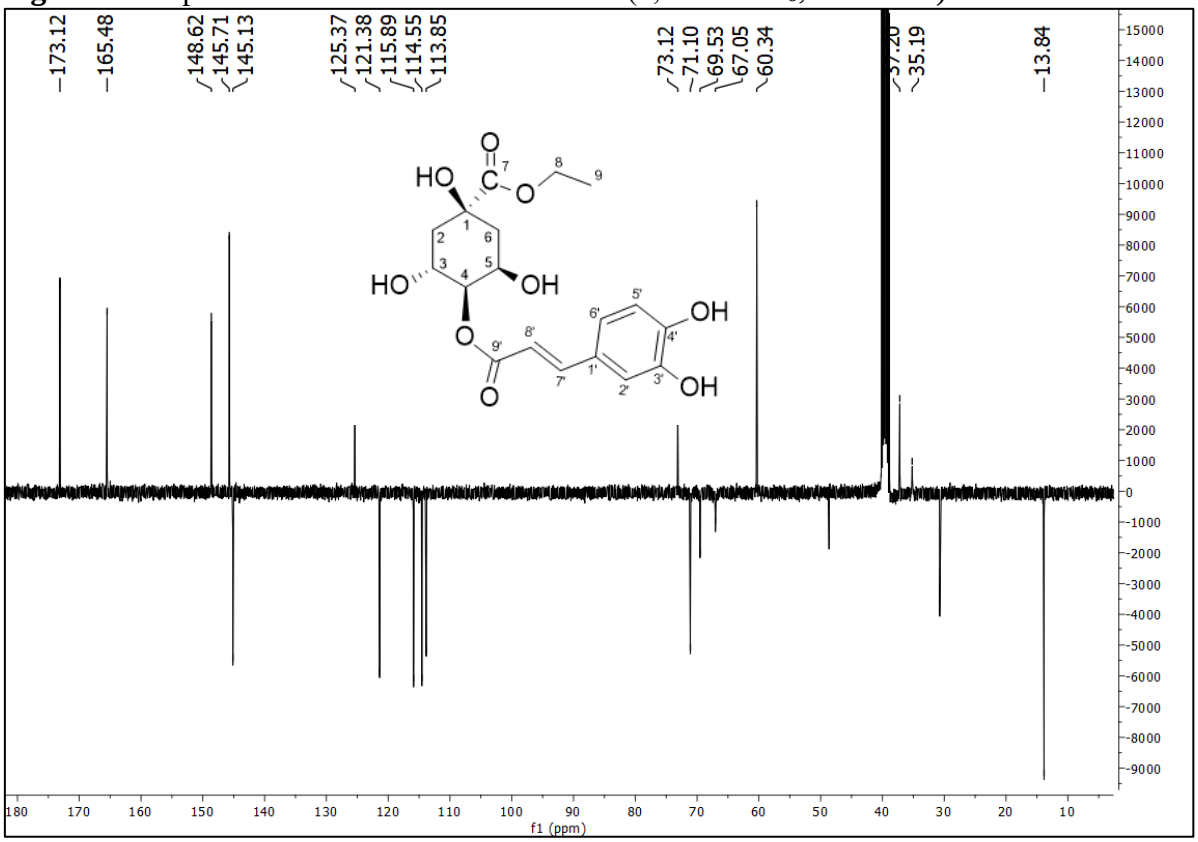



**Figura 43.** Espectro de RMN $^{1}$H/$^{13}$C-HSQC de *Pm*-4 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).

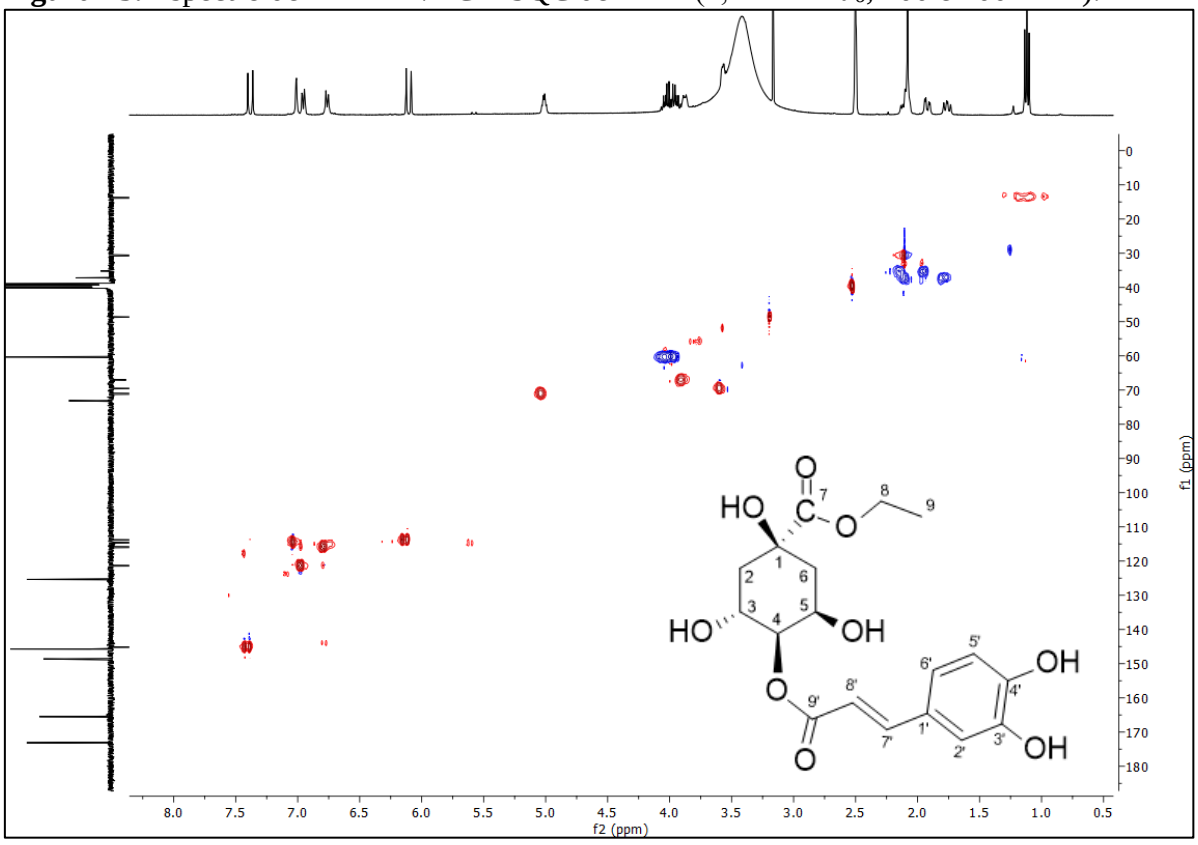
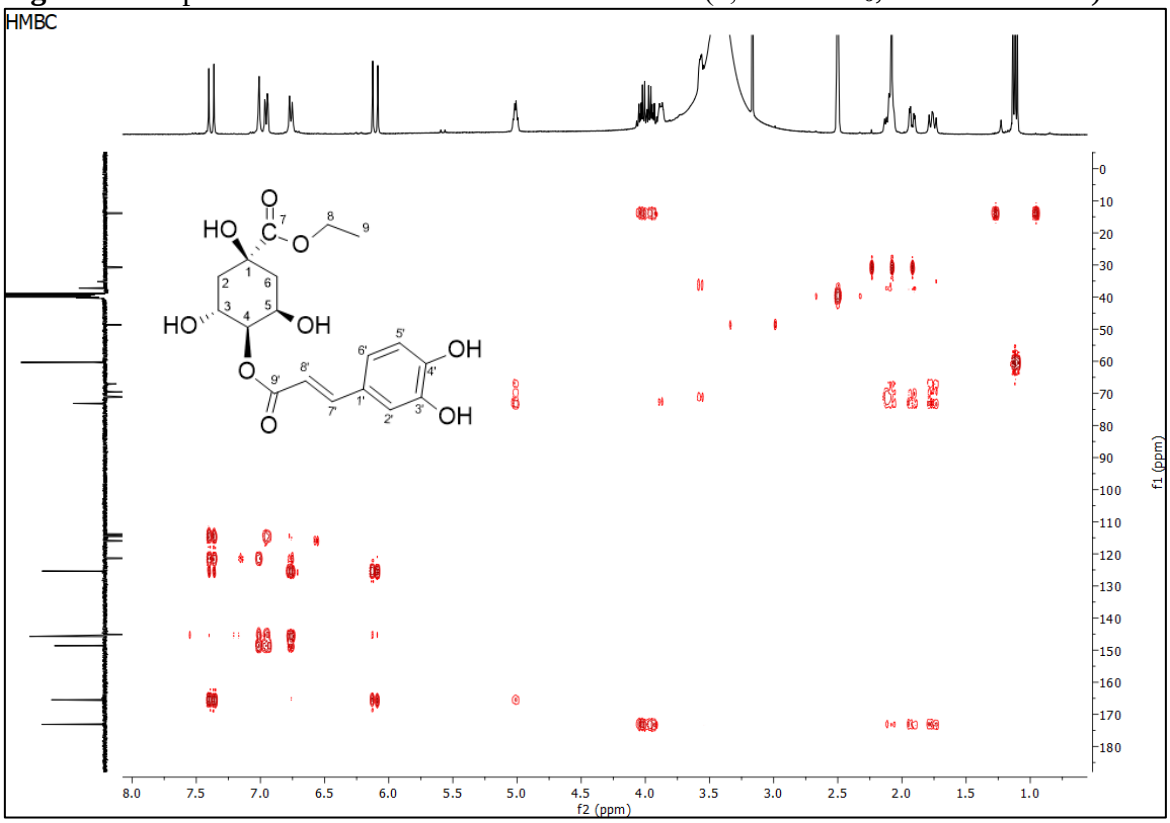


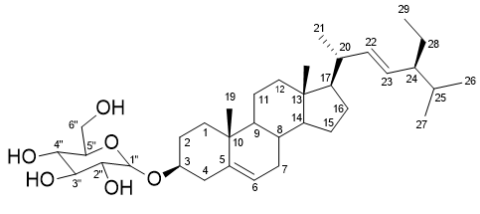
**Figura 44.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HMBC de *Pm*-4 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).



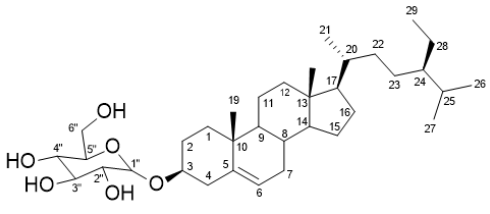
## 5.3 Substâncias isoladas das partes aéreas de *Pavonia cancellata*

O estudo fitoquímico das partes aéreas de *Pavonia cancellata* conduziu ao isolamento e identificação estrutural de nove constituintes químicos (Quadro 17, pág. 111).

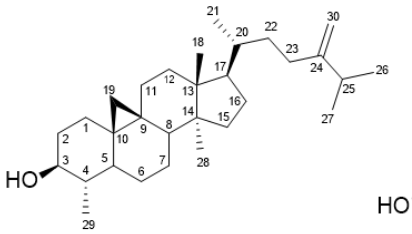
**Quadro 17**. Substâncias isoladas das partes aéreas de *Pavonia cancellata*.



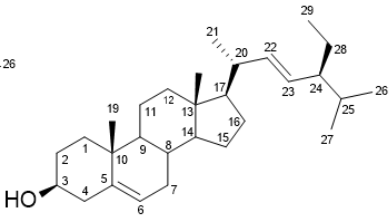
***Pc*-1a**: Estigmasterol glicosilado



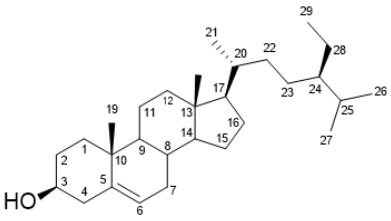
***Pc*-1b**: $\beta$-sitosterol glicosilado



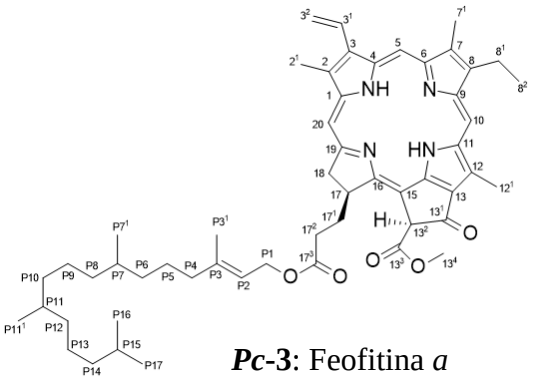
***Pc*-2a**: Cicloeucalenol



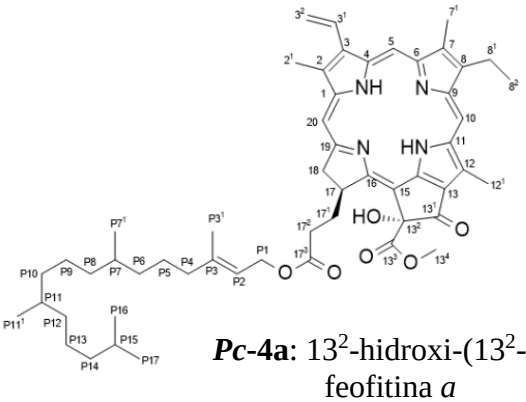
***Pc*-2b**: Estigmasterol



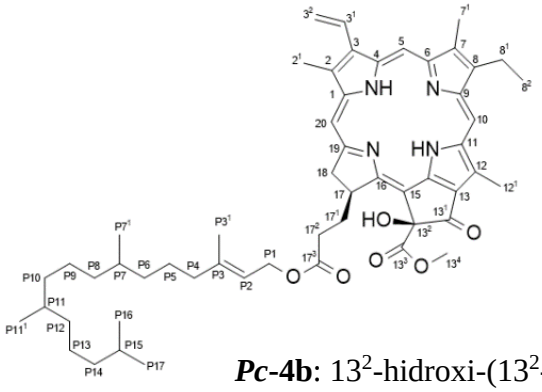
***Pc*-2c**: $\beta$-sitosterol



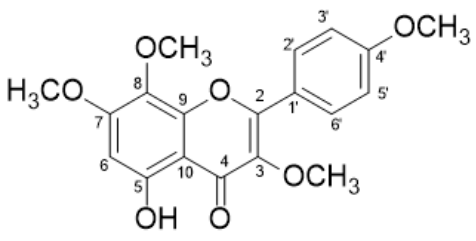
***Pc*-3**: Feofitina *a*



***Pc*-4a**: $13^2$-hidroxi-($13^2$-*R*)-feofitina *a*

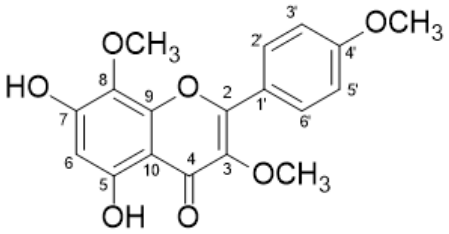


***Pc*-4b**: $13^2$-hidroxi-($13^2$-*S*)-feofitina *a*

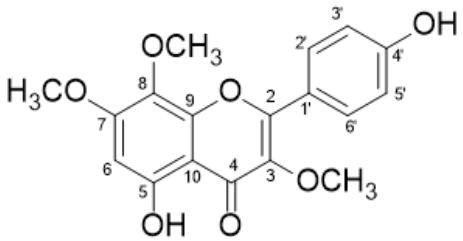


***Pc*-5**: 5,7-dihidroxi-3,7,8,4'-tetrametoxiflavona

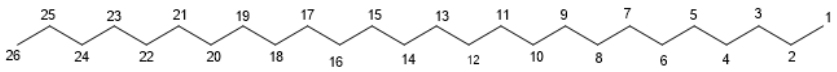
**Quadro 17**. Substâncias isoladas das partes aéreas de *Pavonia cancellata* (cont.).



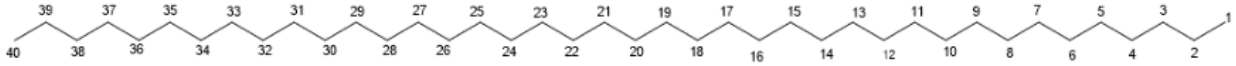
***Pc*-6**: 5,7-di-hidroxi-3,8,4´-trimetoxiflavona



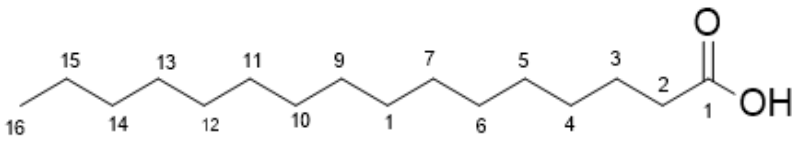
***Pc*-7**: 3,7,8-trimetoxi-herbacetina



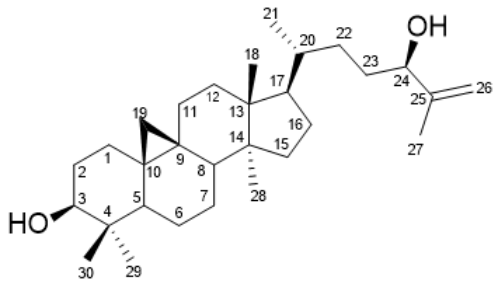
***Pc*-8a**: Hexacosano



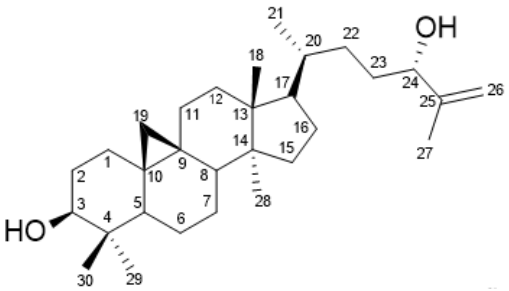
***Pc*-8b**: Tetracontano



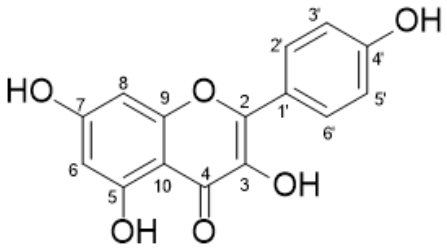
***Pc*-9**: Ácido Palmítico



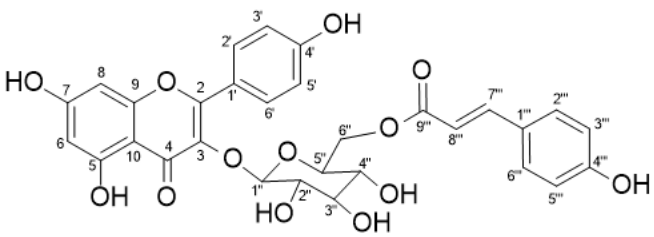
***Pc*-10a**: 24(*R*)-cicloart-25-en-3β,24-diol



***Pc*-10b**: 24(*S*)-cicloart-25-en-3β,24-diol

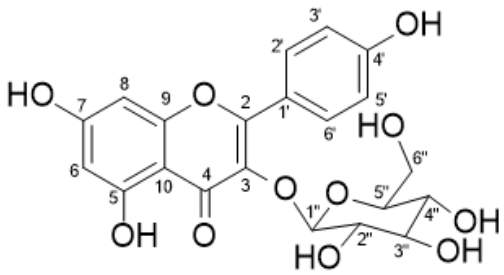


***Pc*-11**: Canferol

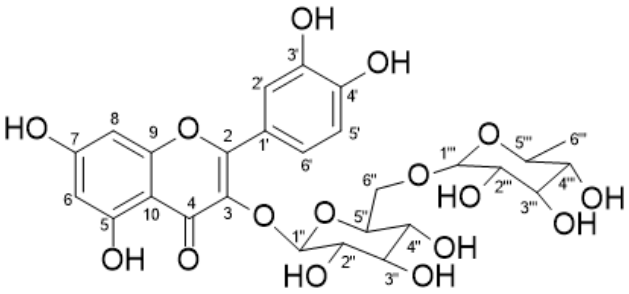


***Pc*-12**: Canferol-3-*O*-*β*-D-(6’’-*E*-*p*-coumaroil) glicopiranosídeo (Tilirosídeo)

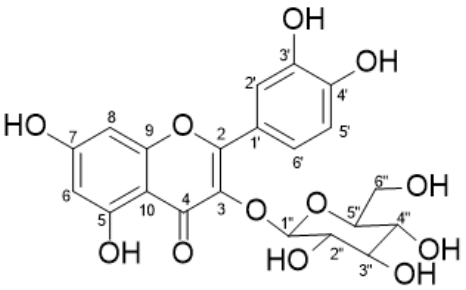
**Quadro 17**. Substâncias isoladas das partes aéreas de *Pavonia cancellata* (cont.).



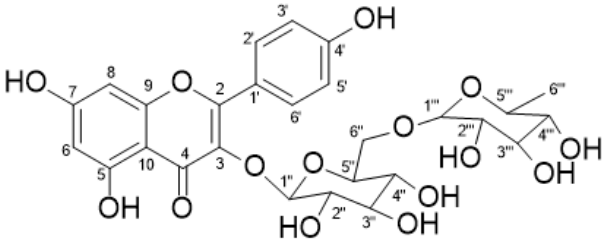
***Pc*-13**: Canferol-3-*O*-*β*-D-glicopiranosídeo (Astragalina)



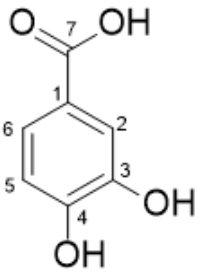
***Pc*-14a**: Rutina



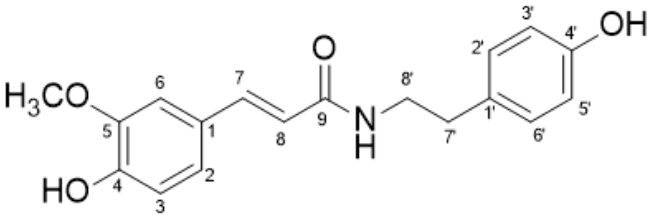
***Pc*-14b**: Isoquercitrina



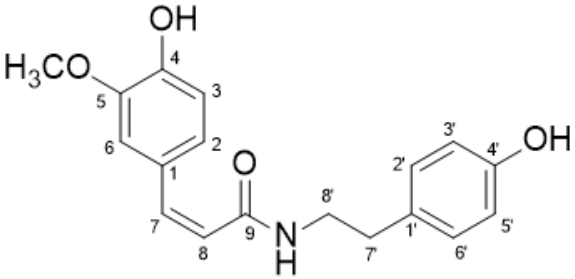
***Pc*-15**: Canferol-3-*O*-rutinosídeo



***Pc*-16**: Ácido 3,4-dihidroxibenzoico (Ácido protocatecuico)



***Pc*-17a**: *N*-*trans*-feruloiltiramina



***Pc*-17b**: *N*-*cis*-feruloiltiramina

## 5.4 Caracterização estrutural das substâncias isoladas de *Pavonia cancellata*

### 5.4.1 Determinação estrutural de *Pc*-1

A substância codificada como *Pc*-1 apresentou-se na forma de precipitados brancos. A análise de seu espectro de RMN $^{1}H$ foi obtida a 400 MHz em $CDCl_3$ (Figura 47, pág. 116), sendo proposta a presença de uma mistura de substâncias devido os sinais sobrepostos e duplicados. A análise do seu espectro de RMN $^{1}H$ exibiu um conjunto de absorções simples e múltiplas na região compreendida entre $\delta_H$ 0,65 e 0,95, característico de hidrogênios metílicos, típico de substâncias com núcleo esteroidal e/ou triterpênico (CHAVES et al., 2013).

Um duplo dupleto foi observado em $\delta_H$ 3,64, permitindo inferir a presença de um hidrogênio oximetínico atribuído ao hidrogênio da posição H-3 de fitoesteroides e terpenoides, além de um sinal para hidrogênio anomérico em $\delta_H$ 4,21 (d, $J$ =7,8 Hz) sugerindo a presença de uma unidade osídica em configuração $\beta$ na molécula (Figura 47, pág. 116) (FERNANDES et al., 2018).

Um sinal de hidrogênio olefínico em $\delta_H$ 5,31 (d, $J$ =1,1 Hz) característico de hidrogênio da posição H-6, sugeriu que *Pc*-1 possuía um núcleo esteroidal. Este dado foi corroborado pelos sinais em $\delta_H$ 5,14 (dd, $J$ =15,1 e 8,6 Hz, 1H) e $\delta_H$ 5,01 (dd, $J$ =15,1 e 8,6 Hz, 1H) (Figura 47, pág. 116) correspondentes aos hidrogênios vinílicos H-22 e H-23, respectivamente, do composto esteroidal estigmasterol. A sobreposição de sinais alifáticos, também indicou a presença do $\beta$-sitosterol como outro constituinte esteroidal da mistura (TELES et al., 2015).

A análise do seu espectro de RMN $^{13}C$ (Figura 48, pág. 117) confirmou a dupla ligação entre os carbonos C-5 e C-6 com sinais em $\delta_C$ 140,51 e $\delta_C$ 121,23, respectivamente (Figura 48, pág. 117). Além disso, os sinais foram ratificados para os carbonos olefínicos em $\delta_C$ 138,09 e $\delta_C$ 128,89, condizentes com os carbonos C-22 e C-23 do estigmasterol, bem como sinais compatíveis com o esqueleto carbônico do $\beta$-sitosterol, com sinais em $\delta_C$ 33,43 e $\delta_C$ 25,54 ppm para os carbonos C-22 e C-23, confirmando a coexistência desses esteroides na mistura (CAVALCANTE et al., 2010) (Figura 49, pág. 117).

A unidade osídica foi atribuída através de um sinal com intensidade para um carbono em $\delta_C$ 61,13, que foi atribuído ao carbono oximetilênico (C-6') e outro sinal referente ao carbono anomérico da unidade de glicose, em $\delta_C$ 100,90 (C-1') (BRITO-FILHO et al., 2014) (Figura 48, pág. 117).

A análise comparativa dos espectros de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ da mistura *Pc*-1a e *Pc*-1b com dados descritos na literatura (Tabela 10, pág. 115) permitiu identificar a presença dos esteroides glicosilados estigmasterol-3-*O*-*β*-*D*-glicopiranosídeo e sitosterol-3-*O*-*β*-*D*-glicopiranosídeo como constituintes majoritários da mistura (Figuras 45 e 46, pág. 115). Esses compostos já foram relatados em espécies da família Malvaceae, incluindo *Pavonia cancellata* (COSTA et al., 2009; CHAVES et al., 2013; FERNANDES, 2013; ALBUQUERQUE et al., 2025; OLIVEIRA et al., 2025).

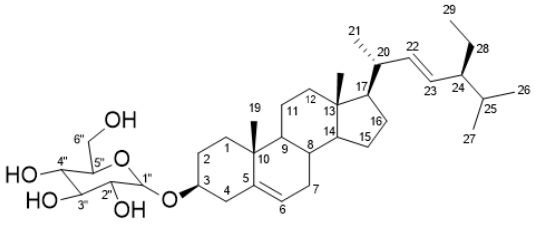


**Figura 45.** Estigmasterol glicosilado

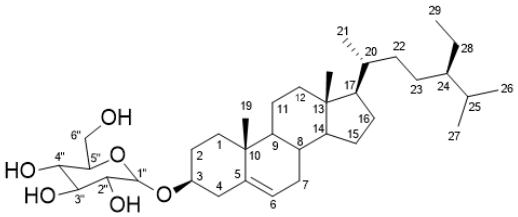


**Figura 46.** *β*-sitosterol glicosilado

**Tabela 10.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-1a e *Pc*-1b** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (δ, $C_5D_5N$, 500 e 125 MHz) (OLIVEIRA et al., 2025) e ***Mo*-2** (δ, $C_5D_5N$, 500 e 125 MHz) (FERNANDES et al., 2018).

| **C** | ***Mo*-1** | | ***Pc*-1a** | | ***Mo*-2** | ***Pc*-1b** |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_C$** | **$\delta_C$** |
| **1** | - | 36,92 | - | 36,28 | 37,60 | 36,28 |
| **2** | - | 30,25 | - | 29,33 | 30,40 | 29,33 |
| **3** | 4,0 (m) | 78,11 | 3,64 (dd, *J* =10,2, 5,6 Hz) | 77,08 | 78,40 | 77,08 |
| **4** | - | 39,34 | - | 41,92 | 39,50 | 41,92 |
| **5** | - | 140,91 | - | 140,51 | 141,10 | 140,51 |
| **6** | 5,38 (d, *J* =3,1 Hz) | 121,89 | 5,31 (d, *J* =1,1 Hz) | 121,23 | 122,10 | 121,23 |
| **7** | - | 32,17 | - | 33,43 | 32,30 | 31,46 |
| **8** | - | 32,05 | - | 31,49 | 32,20 | 31,49 |
| **9** | - | 50,35 | - | 50,70 | 50,50 | 50,70 |
| **10** | - | 37,47 | - | 36,91 | 37,10 | 36,91 |
| **11** | - | 21,28 | - | 20,68 | 21,40 | 20,68 |
| **12** | - | 39,82 | - | 38,39 | 40,90 | 38,39 |
| **13** | - | 42,47 | - | 41,81 | 42,60 | 41,81 |
| **14** | - | 56,83 | - | 55,53 | 57,00 | 55,53 |
| **15** | - | 24,50 | - | 25,54 | 24,70 | 22,69 |
| **16** | - | 29,28 | - | 27,88 | 28,70 | 27,88 |
| **17** | - | 56,25 | - | 56,27 | 56,40 | 56,27 |
| **18** | - | 12,14 | 0,64 (s) | 11,84 | 12,40 | 11,84 |
| **19** | - | 19,16 | 0,94 (s) | 19,15 | 19,60 | 19,15 |
| **20** | - | 36,38 | - | 35,58 | 36,50 | 35,58 |
| **21** | - | 19,96 | 0,77 (s) | 20,99 | 19,20 | 20,99 |
| **22** | 5,25 (dd, *J* =15,1 e 8,7 Hz) | 138,90 | 5,14 (dd, *J* =15,1, 8,6 Hz) | 138,09 | 34,30 | 33,43 |
| **23** | 5,11 (dd, *J* =15,2 e 9,0 Hz) | 129,40 | 5,01 (dd, *J* =15,1, 8,8 Hz) | 128,89 | 26,50 | 25,54 |
| **24** | - | 51,41 | - | 49,69 | 46,20 | 45,23 |
| **25** | - | 32,05 | - | 31,49 | 29,60 | 28,79 |

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| **26** | - | 19,41 | 0,89 (d) | 19,75 | 19,60 | 18,68 |
| **27** | - | 21,45 | 0,80 (d) | 21,18 | 20,20 | 19,00 |
| **28** | - | 25,67 | - | 23,94 | 23,60 | 23,94 |
| **29** | - | 12,49 | 0,79 (d) | 11,72 | 12,10 | 11,72 |
| **1´** | 5,07 (d, *J* =7,7 Hz) | 102,58 | 4,21 (d, *J* =7,8 Hz) | 100,90 | 102,70 | 100,90 |
| **2´** | 4,1 (t, *J* =8,0 Hz) | 75,33 | - | 73,52 | 75,40 | 73,52 |
| **3´** | 4,3 (t, *J* =6,9 Hz) | 78,60 | 4,42 (t, *J* =5,8 Hz) | 76,76 | 78,70 | 76,76 |
| **4´** | 4,3 (t, *J* =6,9 Hz) | 71,71 | 4,42 (t, *J* =5,8 Hz) | 70,12 | 71,80 | 70,12 |
| **5´** | 4,00 (m) | 78,45 | - | 76,81 | 78,50 | 76,81 |
| **6´** | 4,58 (d, *J* =11,1 Hz)<br>4,43 (dd, *J* =8,0 e 5,1 Hz) | 62,85 | 4,86 (d, *J* =2,6 Hz)<br>4,88 (dd, *J* =8,5, 3,6 Hz) | 61,13 | 62,90 | 61,13 |

**Figura 47.** Espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-1 (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).

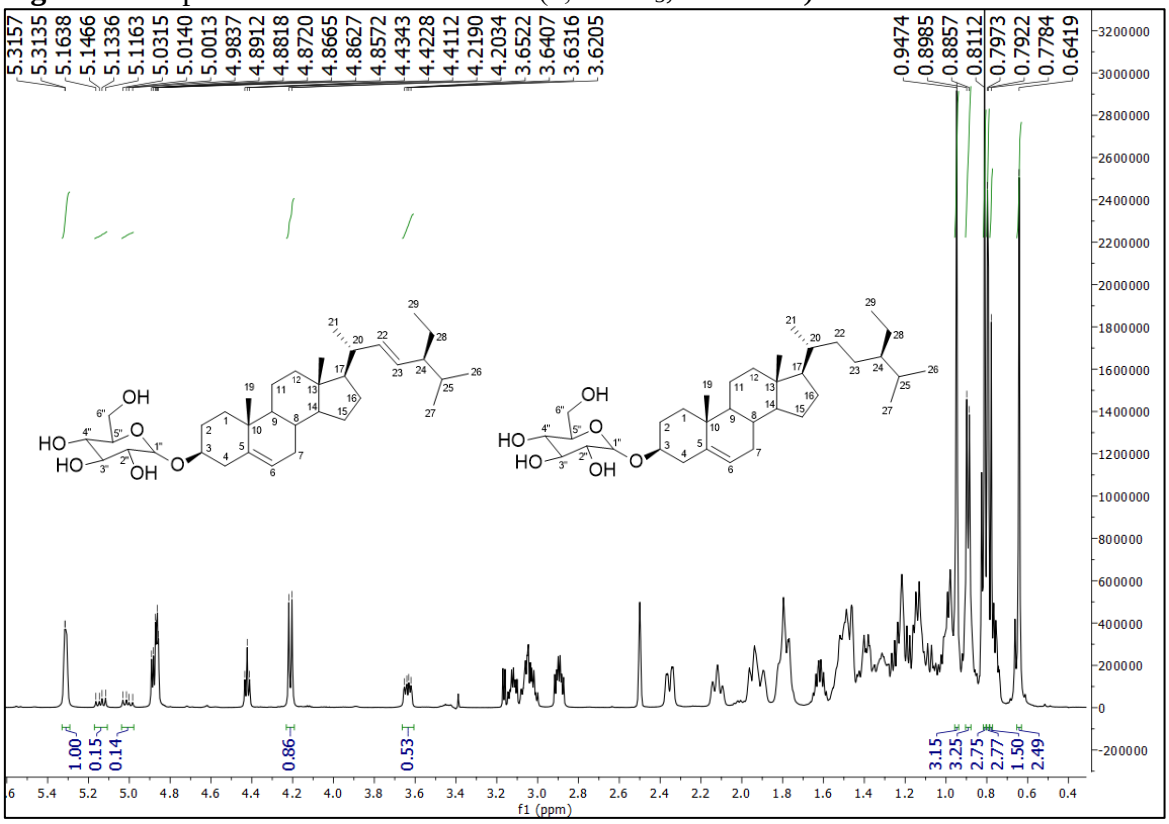


**Figura 48.** Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-1 (δ, $CDCl_3$, 100 MHz).

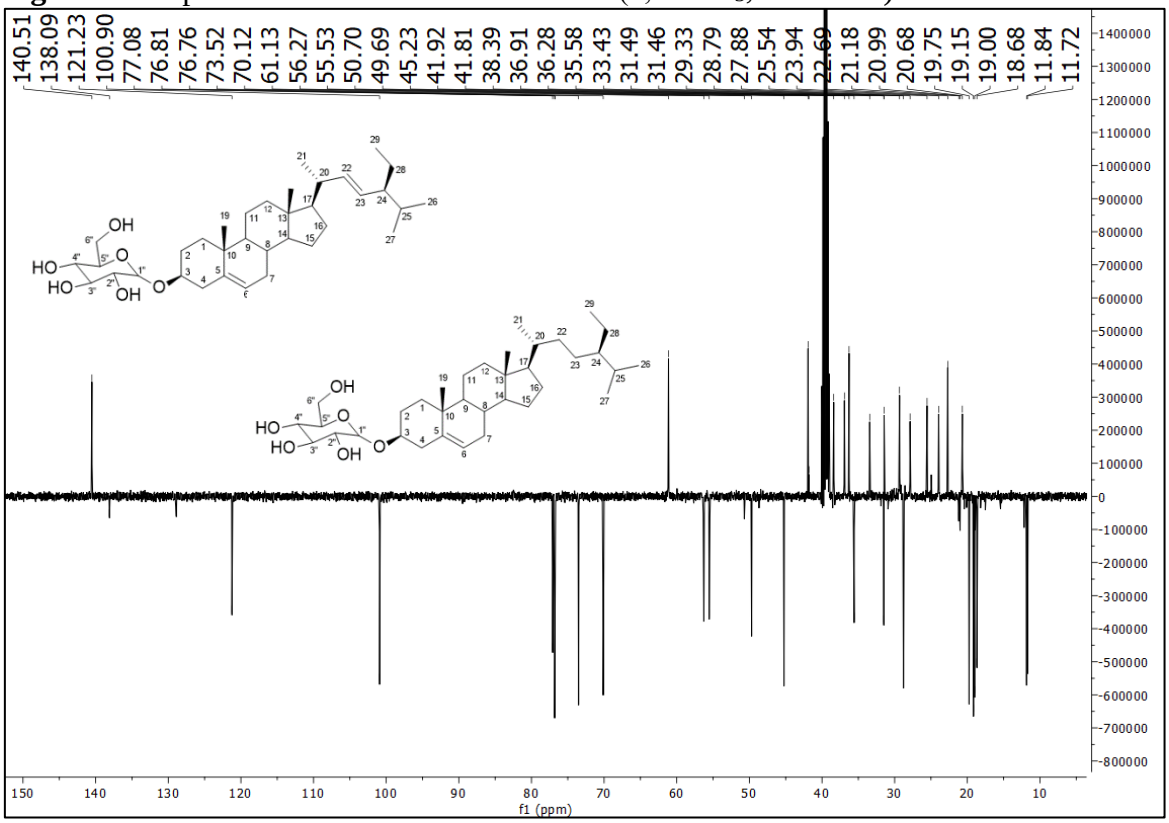
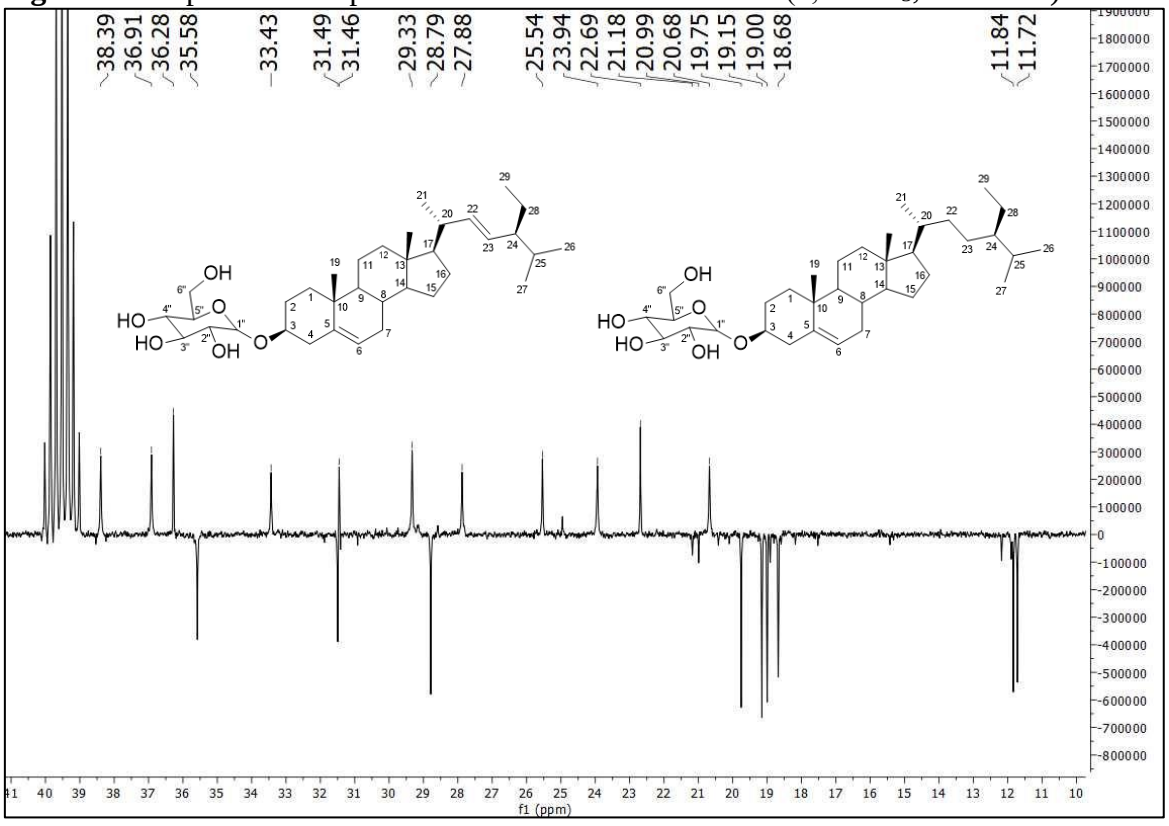



**Figura 49.** Expansão do espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-1 (δ, $CDCl_3$, 100 MHz).



### 5.4.2 Determinação estrutural de *Pc*-2

A substância codificada como *Pc*-2 apresentou-se na forma de precipitados brancos. Seu espectro de RMN $^{1}H$ foi obtido a 400 MHz em $CDCl_3$ (Figura 53, pág. 122). Nas análises preliminares, verificou-se a presença de sinais característicos de esqueleto triterpênico associados aos sinais de esqueleto esteroidal, levando a sugerir a presença de uma mistura de três compostos (*Pc*-2a, *Pc*-2b e *Pc*-2c), fato que levou a buscar analisar cada molécula da amostra separadamente.

Ao analisar as expansões espectrais de *Pc*-2a foram observados dois dupletos bem desprotegidos em $\delta_H$ 0,12 e $\delta_H$ 0,41 com constante de acoplamento de $J$ =4,2 Hz e 4,0 Hz, respectivamente (Figura 54, pág. 123) que, quando comparados com dados do cicloeucalenol, isolado anteriormente, por nossa equipe, da *Herissantia tiubae* (GOMES et al., 2005) foram atribuídos aos hidrogênios H-19 e permitiram sugerir a presença de um anel ciclopropano em anel triterpênico do tipo cicloartano para a substância *Pc*-2a. (GOMES et al., 2005).

Uma outra absorção que fortalece a sugestão para *Pc*-2a foi a existência de sinais para hidrogênios vinílicos em $\delta_H$ 4,64 (d, $J$ =1.4 Hz) e $\delta_H$ 4,70 (dl), referentes aos hidrogênios (Figura 55, pág. 123), H-30a e H-30b, respectivamente, do cicloeulalenol (SILVA et al, 2009). Além disso, o espectro de RMN $^{1}H$ revelou ainda a equivalência para seis sinais característicos de hidrogênios metílicos com deslocamentos químicos em $\delta_H$ 0,99, $\delta_H$ 0,88, $\delta_H$ 1,00, $\delta_H$ 1,02, $\delta_H$ 0,95 e $\delta_H$ 0,81, condizentes com as metilas de núcleo triterpênico das posições H-18, H-21, H-26, H-27, H-28 e H-29, respectivamente. Um multipleto foi evidenciado em $\delta_H$ 3,20 (m) foi atribuido a um hidrogênio oximetínico, indicando a presença da hidroxila da posição H-3 de triterpeno (SANTOS, 2023).

Em análises paralelas aos espectros de RMN $^{13}C$ utilizando a técnica APT operando a 100 MHz (Figura 56, pág. 124) foi possível confirmar a ocorrência de um triterpeno, onde foram observados 30 sinais, sendo seis absorções para carbonos metílicos ($CH_3$), doze sinais para carbonos metilênicos ($CH_2$), sete para carbonos metínicos (CH), e cinco para carbonos não hidrogenados (C).

Adicionada a essas absorções, observou-se a presença de um sinal em $\delta_C$ 27,13 condizente com o carbono metilênico (C-18) do anel ciclopropano que juntamente com os sinais em $\delta_C$ 106,1 e $\delta_C$ 156,9 característicos de grupo vinílico entre os carbonos C-30 e C-24, respectivamente, ratificam a presença de um triterpeno do tipo cicloartano, podendo tratar-se do cicloeucalenol (Figura 57, pág. 124) (SILVA et al., 2009).

Ainda no espectro de RMN $^{13}C$ destaca-se a presença do sinal em $\delta_C$ 76,7, referente a carbono oximetínico, juntamente com absorções em δC 30,6 e δC 14,2, equivalentes aos carbonos (C-1) e (C-29) respectivamente, que fortalecem a proposta de uma substituição na posição C-3, juntamente com a ausência de um sinal de metila no carbono C-4 levou a inferir que o triterpeno se trataria do cicloeucalenol (GOMES et al., 2005; SILVA et al., 2009).

No espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-2b e *Pc*-2c foi possível observar a presença de dois dupletos em $\delta_H$ 5,34 (d, *J* =4,0 Hz) e $\delta_H$ 5,32 (d, *J* =2,0 Hz), respectivamente, característicos de hidrogênio olefínico da posição H-6, sugestivos de núcleo esteroidal. Dois multipletos em $\delta_H$ 3,67 e $\delta_H$ 3,49 foram evidenciados condizentes com a presença de um hidrogênio oximetínico, indicando a presença de hidroxila da posição H-3 em ambos os compostos (TELES et al., 2015; FERNANDES et al., 2018).

Para o composto *Pc*-2b evidenciou-se a presença de dois duplos dupletos em $\delta_H$ 5,13 (dd, *J* =15,1 e 8,5 Hz, 1H) e 5,00 (dd, *J* =15,1 e 8,7 Hz, 1H) correspondente aos hidrogênios vinílicos H-22 e H-23, respectivamente, do composto esteroidal estigmasterol (FERREIRA et al, 2019).

A análise dos dados espectrais de RMN $^{13}C$ dos compostos *Pc*-2b e *Pc*-2c permitiu observar 29 sinais em cada substância. Sinais em $\delta_C$ 140,8 e δC 121,7, referentes aos carbonos C-5 e C-6, , ambos com intensidade para 2C, respectivamente (Figura 57, pág. 123) revelou que *Pc*-2b e *Pc*-2c possuem núcleo esteroidal, todavia a presença dos sinais em $\delta_C$ 138,4 e $\delta_C$ 129,4 com intensidade para um carbono, evidenciou uma dupla ligação referente aos carbonos C-22 e C-23, permitindo propor que *Pc*-2b, tratava-se do estigmasterol, enquanto sinais em $\delta_C$ 34,7 e $\delta_C$ 27,0 com intensidade para um carbono, cada, foram atribuidos aso carbonos aos carbonso C-22 e C-23, respectivamente, sugestivo portanto, que *Pc*-2c tratava-se do β-sitosterol. (FERNANDES et al., 2018).

A análise dos dados espectrais de RMN $^{1}H$ e RMN $^{13}C$ e comparações com dados da literatura permitiram definir que a substância *Pc*-2 se trata da uma mistura de três compostos, sendo *Pc*-2a um triterpeno, cicloeucalenol, isolado pela primeira vez no gênero *Pavonia* (Tabela 11, pág. 120) (Figura 50, pág. 120), e dois fitoesteroides *Pc*-2b (estigmasterol) (Tabela 12, pág. 121) (Figura 51, pág. 120) e *Pc*-2c (*β*-sitosterol) (Tabela 13, pág. 121) (Figura 52, pág. 120), amplamente difundidas entre as espécies vegetais e isolados anteriormente em diversas espécies da família Malvaceae (FERNANDES et al., 2018; ASSIS, 2019, FERREIRA et al., 2019).

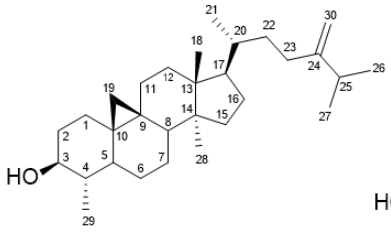


**Figura 50.** Cicloeucalenol

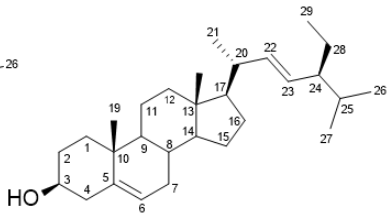


**Figura 51.** Estigmasterol

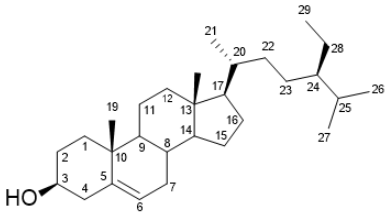


**Figura 52.** *β*-sitosterol

**Tabela 11.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-2a** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (δ, $CDCl_3$, 300 e 75 MHz) (GOMES et al., 2005; SILVA et al., 2009).

| C | *Mo-1* | | *Pc*-2a | |
|---|---|---|---|---|
| | $\delta_H$ | $\delta_C$ | $\delta_H$ | $\delta_C$ |
| **1** | - | 30,65 | - | 30,59 |
| **2** | - | 34,85 | - | 35,09 |
| **3** | 3,25 (m) | 76,47 | 3,20 (m) | 76,67 |
| **4** | - | 44,40 | - | 44,55 |
| **5** | 1,03 (m) | 43,19 | 1,02 (d, *J* =2,2 Hz) | 43,42 |
| **6** | 1,82 (m) | 24,53 | 1,80 (m) | 24,70 |
| **7** | - | 27,11 | - | 27,86 |
| **8** | - | 46,74 | - | 46,21 |
| **9** | - | 23,39 | - | 23,38 |
| **10** | - | 29,37 | - | 29,37 |
| **11** | - | 25,02 | - | 25,84 |
| **12** | - | 35,74 | - | 35,23 |
| **13** | - | 45,19 | - | 45,47 |
| **14** | - | 48,75 | - | 49,15 |
| **15** | 1,32 (t) | 32,73 | 1,71 (t, *J* =5,4 Hz) | 32,93 |
| **16** | 1,58 (m) | 26,82 | 1,59 (m) | 26,17 |
| **17** | 1,48 (t) | 52,20 | - | 52,21 |
| **18** | 0,98 | 17,50 | 0,99 (s) | 17,48 |
| **19a** | 0,15 (d, *J* =3,9 Hz) | 27,11 | 0,12 (d, *J* =4,0 Hz) | 27,13 |
| **19b** | 0,40 (d, *J* =3,8 Hz) | | 0,41 (d, *J* =4,0 Hz) | |
| **20** | 1,39 (m) | 35,98 | 1,38 (m) | 36,22 |
| **21** | 0,88 (d, *J* =6,6 Hz) | 18,19 | 0,88 (s) | 18,46 |
| **22** | 1,29 | 35,20 | 1,29 (m) | 35,14 |
| **23** | 1,98 (m) | 31,17 | 1,98 (m) | 31,38 |
| **24** | - | 157,00 | - | 156,89 |
| **25** | - | 33,65 | - | 33,87 |
| **26** | 1,01 (s) | 21,86 | 1,00 (d, *J* =2,2 Hz) | 22,08 |
| **27** | 1,03 (d, *J* =6,6 Hz) | 21,73 | 1,02 (d, *J* =6,6 Hz) | 21,95 |
| **28** | 0,90 (s) | 18,99 | 0,95 (s) | 18,87 |
| **29** | 0,84 (d, *J* =6,6 Hz) | 14,27 | 0,81 (d, *J* =6,6 Hz) | 14,21 |
| **30a** | 4,66 (d, *J* =1,7 Hz) | 107,00 | 4,64 (d, *J* =1,4 Hz) | 106,06 |
| **30b** | 4,71 (d, *J* =1,6 Hz) | | 4,70 (s) | |

**Tabela 12.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-2b** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) (FERREIRA et al., 2019).

| C | ***Mo*-1** | | ***Pc*-2b** | |
|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** |
| **1** | - | 37,40 | - | 37,64 |
| **2** | - | 31,70 | - | 31,60 |
| **3** | 3,52 (m) | 71,90 | 3,67 (m) | 71,30 |
| **4** | - | 42,40 | - | 42,40 |
| **5** | - | 140,80 | - | 140,83 |
| **6** | 5,34 (dl, *J* =5,2 Hz) | 121,80 | 5,34 (d, *J* =4,0 Hz) | 121,74 |
| **7** | - | 32,00 | - | 31,99 |
| **8** | - | 32,00 | - | 31,98 |
| **9** | - | 50,20 | - | 50,09 |
| **10** | - | 36,30 | - | 36,59 |
| **11** | - | 21,20 | - | 21,17 |
| **12** | - | 39,70 | - | 39,77 |
| **13** | - | 42,40 | - | 42,29 |
| **14** | - | 57,00 | - | 56,95 |
| **15** | - | 24,50 | - | 24,45 |
| **16** | - | 29,20 | - | 29,00 |
| **17** | - | 56,20 | - | 56,04 |
| **18** | - | 12,10 | - | 12,13 |
| **19** | - | 19,50 | - | 19,47 |
| **20** | - | 40,50 | - | 40,57 |
| **21** | - | 21,20 | - | 21,31 |
| **22** | 5,03 (d, *J* =8,8 Hz) | 138,40 | 5,00 (dd, *J* =15,1 e 8,7 Hz) | 138,40 |
| **23** | 5,13 (d, *J* =8,4 Hz) | 129,40 | 5,13 (dd, *J* =15,1 e 8,5 Hz) | 129,35 |
| **24** | - | 51,30 | - | 51,32 |
| **25** | - | 29,40 | - | 31,96 |
| **26** | - | 20,60 | - | 19,91 |
| **27** | - | 19,10 | - | 19,07 |
| **28** | - | 25,40 | - | 25,49 |
| **29** | - | 12,30 | - | 12,34 |

**Tabela 13.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-2c** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) (FERNANDES et al., 2018).

| C | ***Mo*-1** | | ***Pc*-2c** | |
|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** |
| **1** | - | 37,60 | - | 37,34 |
| **2** | - | 31,90 | - | 31,58 |
| **3** | 3,50 (m) | 72,00 | 3,49 (m) | 71,85 |
| **4** | - | 42,50 | - | 42,40 |
| **5** | - | 140,80 | - | 140,83 |
| **6** | 5,32 (d, *J* =5,1 Hz) | 121,80 | 5,32 (d, *J* =2,0 Hz) | 121,74 |
| **7** | - | 32,10 | - | 32,01 |
| **8** | - | 32,20 | - | 31,98 |
| **9** | - | 50,50 | - | 50,22 |
| **10** | - | 36,50 | - | 36,57 |
| **11** | - | 21,20 | - | 21,17 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| **12** | - | 40,00 | - | 39,86 |
| **13** | - | 42,20 | - | 42,23 |
| **14** | - | 57,10 | - | 56,85 |
| **15** | - | 24,50 | - | 24,38 |
| **16** | - | 28,30 | - | 29,00 |
| **17** | - | 56,20 | - | 56,15 |
| **18** | 0,65 (s) | 12,00 | 0,66 (s) | 11,94 |
| **19** | 0,98 (s) | 19,50 | 0,99 (s) | 19,47 |
| **20** | - | 36,20 | - | 36,22 |
| **21** | - | 18,90 | - | 19,01 |
| **22** | - | 34,00 | - | 34,76 |
| **23** | - | 26,20 | - | 27,02 |
| **24** | - | 45,90 | - | 45,91 |
| **25** | - | 29,20 | - | 29,24 |
| **26** | - | 19,90 | - | 19,91 |
| **27** | - | 19,10 | - | 19,14 |
| **28** | - | 23,20 | - | 23,15 |
| **29** | 0,78 (s) | 12,20 | 0,79 (s) | 12,07 |

**Figura 53.** Espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-2 (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).

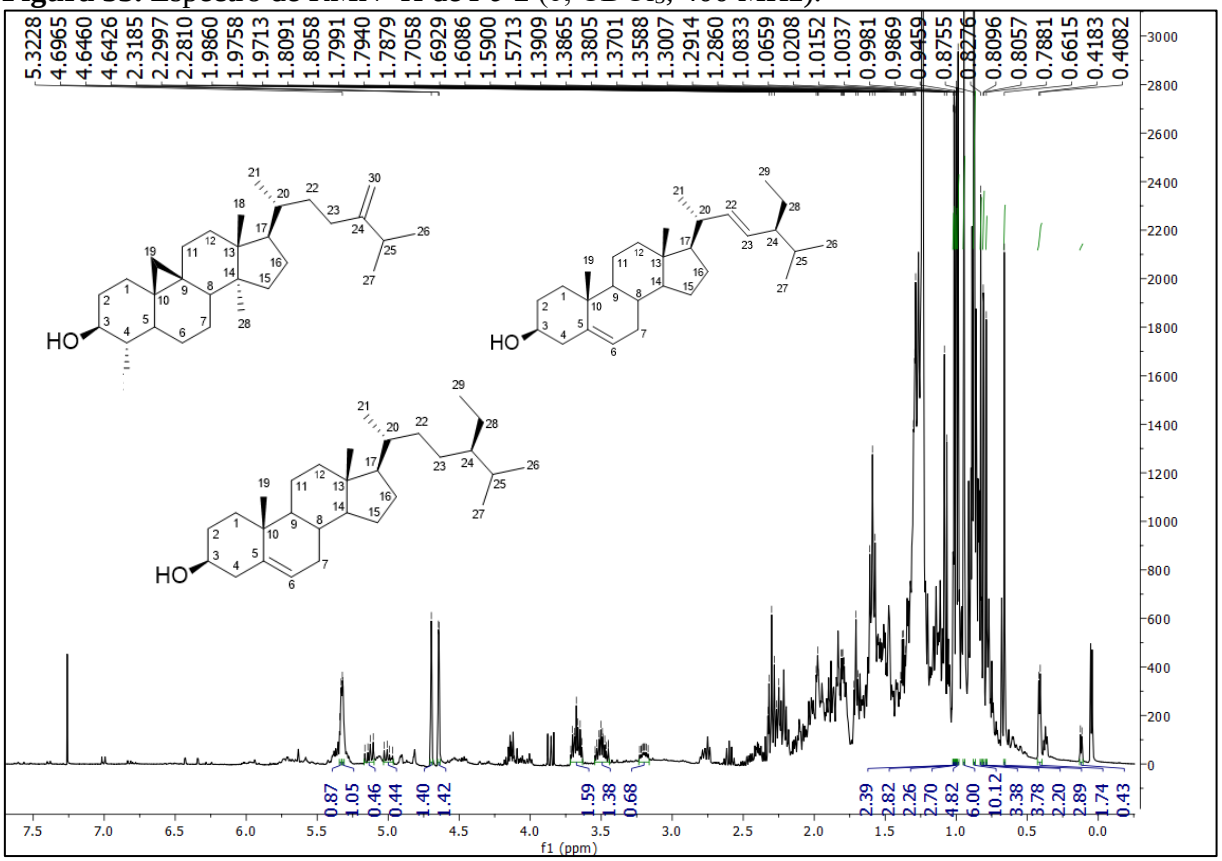


**Figura 54.** Expansão do espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-2 na região entre 0,1 e 0,5 ppm (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).

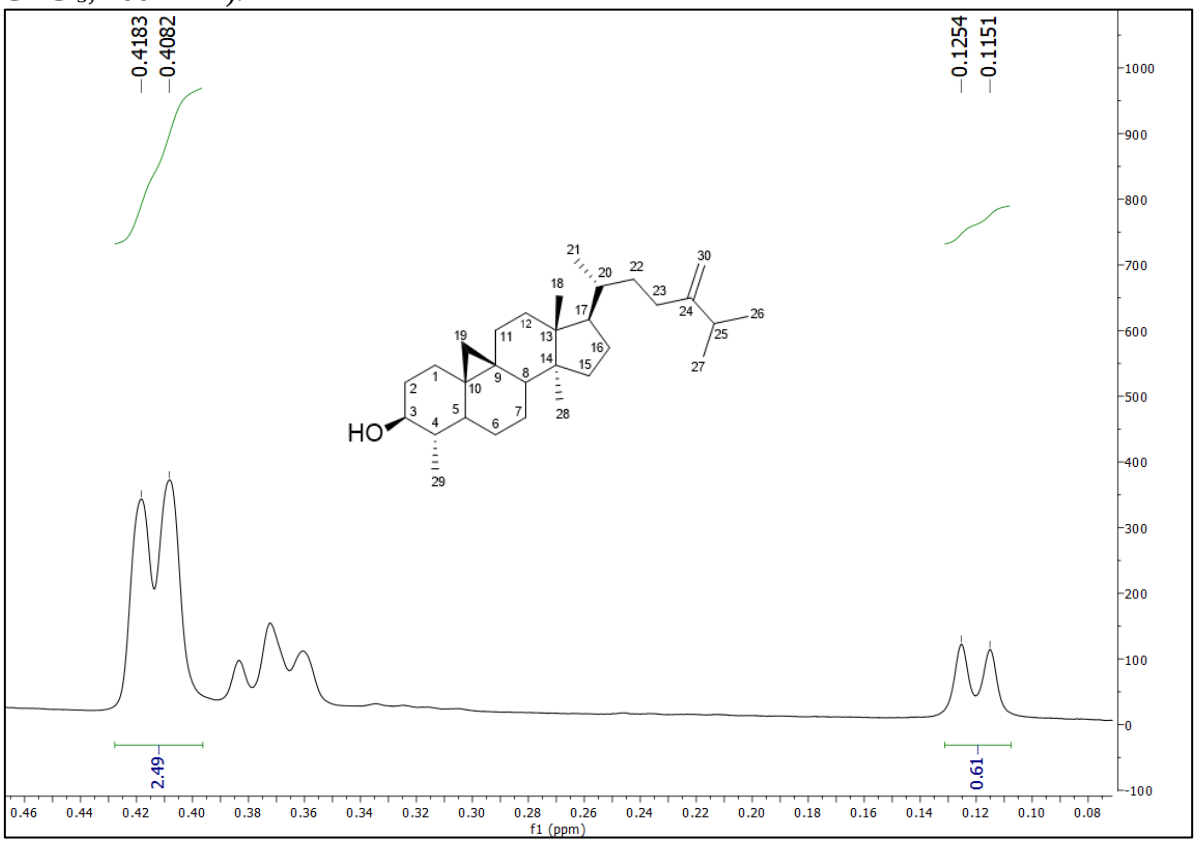



**Figura 55.** Expansão do espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-2 na região entre 4,6 e 4,7 ppm (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).

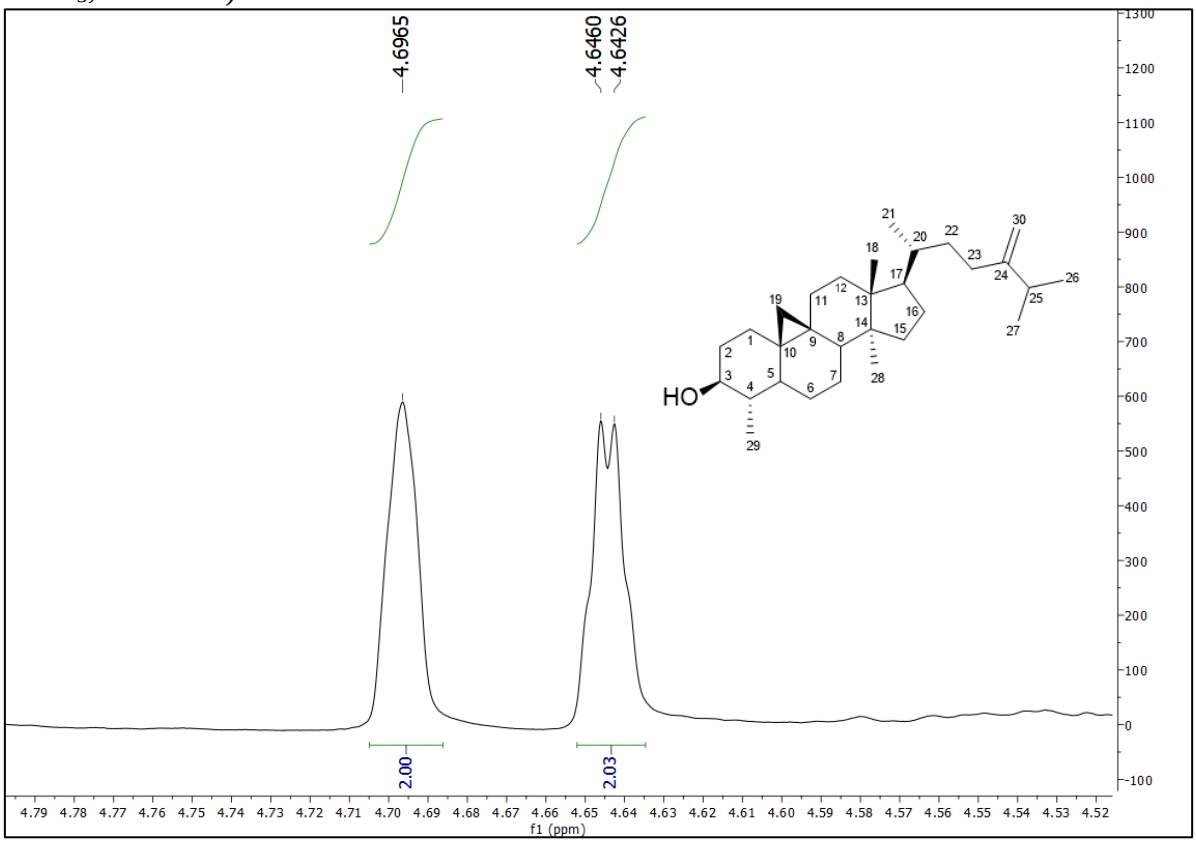


**Figura 56.** Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-2 (δ, $CDCl_3$, 100 MHz).

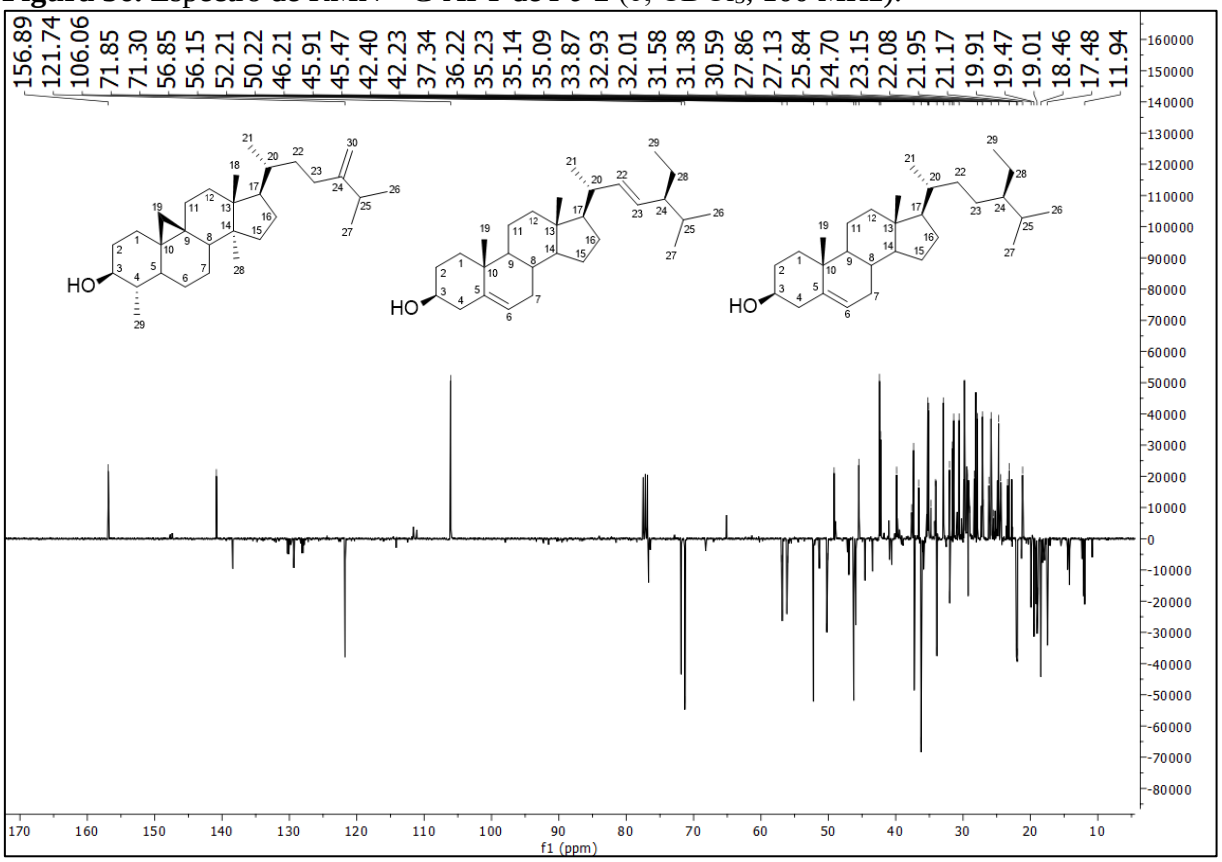
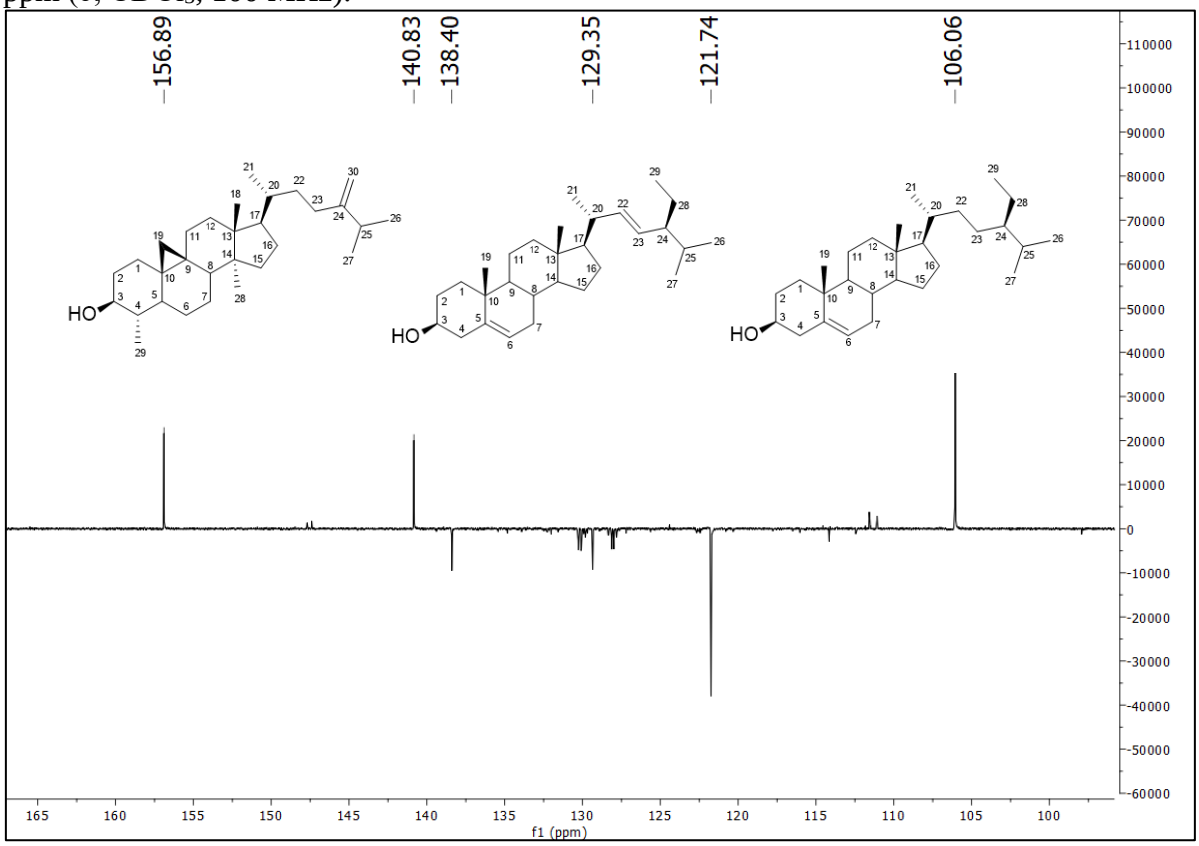



**Figura 57.** Expansão do espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-2 na região entre 106,0 e 157,0 ppm (δ, $CDCl_3$, 100 MHz).



### 5.4.3 Determinação estrutural de *Pc*-3

A substância codificada como *Pc*-3 apresentou-se como um sólido amorfo verde escuro. O espectro de RMN $^{1}H$ foi obtido a 400 MHz em $CDCl_3$ (Figura 60, pág. 128). Suas expansões exibiram absorções que levaram a sugerir que a substância possuía um núcleo porfirínico em sua estrutura.

A sugestão foi fortalecida pelos sinais para quatro metilas de anéis pirrólicos em $\delta_H$ 3,80 ($CH_3$-$12^1$), $\delta_H$ 3,39 ($CH_3$-$2^1$), $\delta_H$ 3,22 ($CH_3$-$7^1$) e $\delta_H$ 1,86 ($CH_3$-$18^1$), referentes às metilas dos anéis III, I e II, IV do núcleo porfirínico, respectivamente (Figura 62, pág. 129). O sinal em $\delta_H$ 3,22 atribuído ao $CH_3$-$7^1$ permitiu propor que *Pc*-3 tratar-se-ia da feofitina *a*, uma vez que a feofitina *b* possui, em C-$7^1$, um grupo aldeído com sinal em $\delta_H$ 11,13 (BRITO-FILHO et al., 2014; TELES et al., 2014).

O espectro de RMN $^{1}H$ ainda fortalece a proposta do núcleo porfirínico ao se evidenciar sinais para hidrogênios vinílicos H-$3^1$ em $\delta_H$ 7,98 (dd, $J$ =18,1 e 11,4 Hz) acoplando em *trans* com *Ha*-$3^2$ em 6,27 (d, $J$ =17,4 Hz) e *cis* com *Hb*-$3^2$ em 6,17 (dd, $J$ =11,6 e 1,3 Hz) (Figura 63, pág. 130). Três hidrogênios olefínicos foram observados em $\delta_H$ 9,36, $\delta_H$ 9,50 e $\delta_H$ 8,54 condizentes com os hidrogênios H-5, H-10 e H-20 respectivamente (Figura 61, pág. 129), do núcleo porfirínico de feofitinas (CHAVES et al., 2013; NOGUEIRA et al., 2013).

Um simpleto em $\delta_H$ 3,87 (H-$13^4$) apresentou intensidade com integração para três hidrogênios típico de substituinte metoxila (Figura 62, pág. 129). Ainda foi possível evidenciar um tripleto absorvendo em $\delta_H$ 1,71 condizente com hidrogênios do grupo $CH_3$, da posição C-$8^2$. Outro simpleto absorvendo em $\delta_H$ 6,25 estava condizente com o hidrogênio da posição $13^2$ (Figura 63, pág. 130), indicando que essa posição também encontrava-se hidrogenada (FERNANDES et al., 2018).

Pode-se sugerir, em *Pc*-3, a presença de um grupo fitil éster em sua estrutura química, na posição C-$17^3$. Esta sugestão foi confirmada pela presença de um envelope de sinais para hidrogênios metílicos, metilênicos e metínicos entre $\delta_H$ 0,8 e $\delta_H$ 2,0 ppm (Figura 60, pág. 128). A ligação deste radical fitil éster ao C-$17^3$ foi ratificada uma vez que seus dados foram comparados com a substância $17^3$-etoxifeoforbídeo que não possui este radical (CHAVES et al., 2013).

A análise dos espectros de RMN $^{13}C$ utilizando a técnica APT (Figura 64, pág. 130) revelou picos para os cinquenta e cinco átomos de carbono da estrutura, sendo dezenove carbonos não hidrogenados (C), onze carbonos metínicos (CH), quatorze

carbonos metilênicos ($CH_2$), e onze carbonos metílicos ($CH_3$).

Alguns sinais que são característicos do núcleo porfirínico das feofitinas ganham destaque quando se ressalva a presença dos carbonos vinílicos com absorções em $\delta_C$ 122,90 e $\delta_C$ 130,12 correspondentes aos carbonos C-$3^2$ e C-$3^1$ das feofitinas, respectivamente e um sinal em $\delta_C$ 52,96 típico de metoxila de éster (Figura 64, pág. 130), fortalecendo o que foi sugerido no RMN $^1$H para a existência desse grupo (BRITO-FILHO et al., 2017).

A presença de um envelope com 17 absorções foi atribuída ao grupo fitil éster (Figura 59, pág. 128), juntamente com as referências para o núcleo porfirínico da feofitina *a*, sugeridas pelos dados espectrais de RMN $^1$H foram agora confirmadas pela compilação dos dados espectrais de RMN $^{13}$C correspondentes (Tabela 15, pág. 127).

Após a análise dos espectros de RMN $^1$H e RMN $^{13}$C de *Pc*-3 comparados com dados da literatura (Tabela 14, pág. 126) foi possível identificar a substância codificada como sendo a feofitina *a* (Figura 58, pág. 126), substância esta isolada em outras espécies da família Malvaceae (CHAVES et al., 2013, GOMES et al., 2015; TELES et al., 2015; FERNANDES et al., 2018) e pela primeira vez na espécie em estudo.

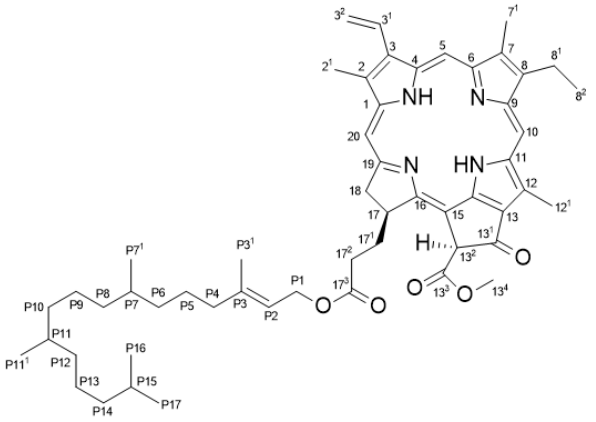


**Figura 58.** Feofitina *a*

**Tabela 14.** Dados comparativos de RMN $^1$H e $^{13}$C de ***Pc*-3** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) (FERNANDES et al., 2018).

| **C** | ***Mo*-1** | | ***Pc*-3** | |
|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** |
| **1** | - | 142,90 | - | 142,94 |
| **2** | - | 131,90 | - | 131,37 |
| **$2^1$** | 3,38 (s) | 12,10 | 3,39 (s) | 11,35 |
| **3** | - | 138,60 | - | 138,26 |
| **$3^1$** | 7,96 (dd, *J* =17,96 e 11,28 Hz) | 129,00 | 7,98 (dd, *J* =18,1, 11,4 Hz) | 130,12 |
| **$3^2$** | 6,28 (*trans*) (dd, *J* =17,8 Hz) e 6,16 (*cis*) (dd, *J* =11,56 e 3,0 Hz) | 122,80 | 6,27 (*trans*) (d, *J* =17,4 Hz) e | 122,90 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| | | | 6,17 (*cis*) (dd, *J* =11,6, 1,3 Hz) | |
| **4** | - | 136,30 | - | 136,65 |
| **5** | 9,33 (s) | 97,60 | 9,36 (s) | 97,64 |
| **6** | - | 155,70 | - | 155,80 |
| **7** | - | 136,20 | - | 136,30 |
| **7$^{1}$** | 3,19 (s) | 11,30 | 3,22 (s) | 10,85 |
| **8** | - | 145,30 | - | 145,35 |
| **8$^{1}$** | 3,67 (s) | 19,80 | 3,67 (s) | 19,57 |
| **8$^{2}$** | 1,62 (t) | 17,50 | 1,71 (t) | 17,04 |
| **9** | - | 159,70 | - | 159,85 |
| **10** | 9,48 (s) | 104,50 | 9,50 (s) | 104,54 |
| **11** | - | 138,00 | - | 138,03 |
| **12** | - | 129,10 | - | 129,73 |
| **12$^{1}$** | 3,82 (s) | 12,20 | 3,80 (s) | 12,20 |
| **13** | - | 129,10 | - | 128,72 |
| **13$^{1}$** | - | 189,70 | - | 189,82 |
| **13$^{2}$** | 6,27 (s) | 64,80 | 6,25 (s) | 64,80 |
| **13$^{3}$** | - | 169,70 | - | 164,75 |
| **13$^{4}$** | 3,89 (s) | 52,90 | 3,87 (s) | 52,96 |
| **14** | - | 151,10 | - | 151,12 |
| **15** | - | 105,30 | - | 105,32 |
| **16** | - | 161,30 | - | 161,38 |
| **17** | 4,16 (m) | 51,20 | 4,17 (m) | 51,24 |
| **17$^{1}$** | - | 29,80 | - | 29,80 |
| **17$^{2}$** | - | 31,30 | - | 32,03 |
| **17$^{3}$** | - | 173,00 | - | 173,12 |
| **18** | 4,48 (m) | 50,20 | 4,47 (m) | 50,11 |
| **18$^{1}$** | 1,81 (d) | 23,20 | 1,86 (d, *J* =1,4 Hz) | 22,72 |
| **19** | - | 172,30 | - | 172,38 |
| **20** | 8,55 (s) | 93,20 | 8,54 (s) | 93,24 |

**Tabela 15.** Dados comparativos de RMN $^{1}$H e $^{13}$C de ***Pc*-3** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) (FERNANDES, et al., 2018).

| **C** | ***Mo*-1** | ***Pc*-3** |
|---|---|---|
| | **$\delta_C$** | **$\delta_C$** |
| **P1** | 61,60 | 61,59 |
| **P2** | 117,85 | 117,82 |
| **P3** | 142,95 | 142,91 |
| **P4** | 40,82 | 41,06 |
| **P5** | 26,54 | 25,88 |
| **P6** | 37,51 | 37,66 |
| **P7** | 32,88 | 32,86 |
| **P8** | 37,38 | 37,40 |

| | | |
|---|---|---|
| **P9** | 24,59 | 24,72 |
| **10** | 37,04 | 36,74 |
| **P11** | 32,73 | 32,71 |
| **P12** | 37,44 | 37,49 |
| **P13** | 24,89 | 24,87 |
| **P14** | 39,50 | 39,45 |
| **P15** | 28,11 | 29,95 |
| **P16** | 23,58 | 23,16 |
| **P17** | 22,82 | 22,82 |
| **P11$^{1}$** | 19,78 | 19,75 |
| **P7$^{1}$** | 19,84 | 19,82 |
| **P3$^{1}$** | 17,53 | 17,52 |

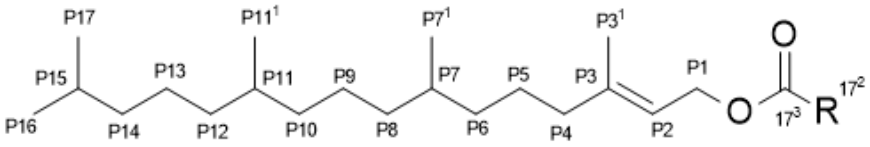



**Figura 59.** Radical fitil.

**Figura 60.** Espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-3 (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).

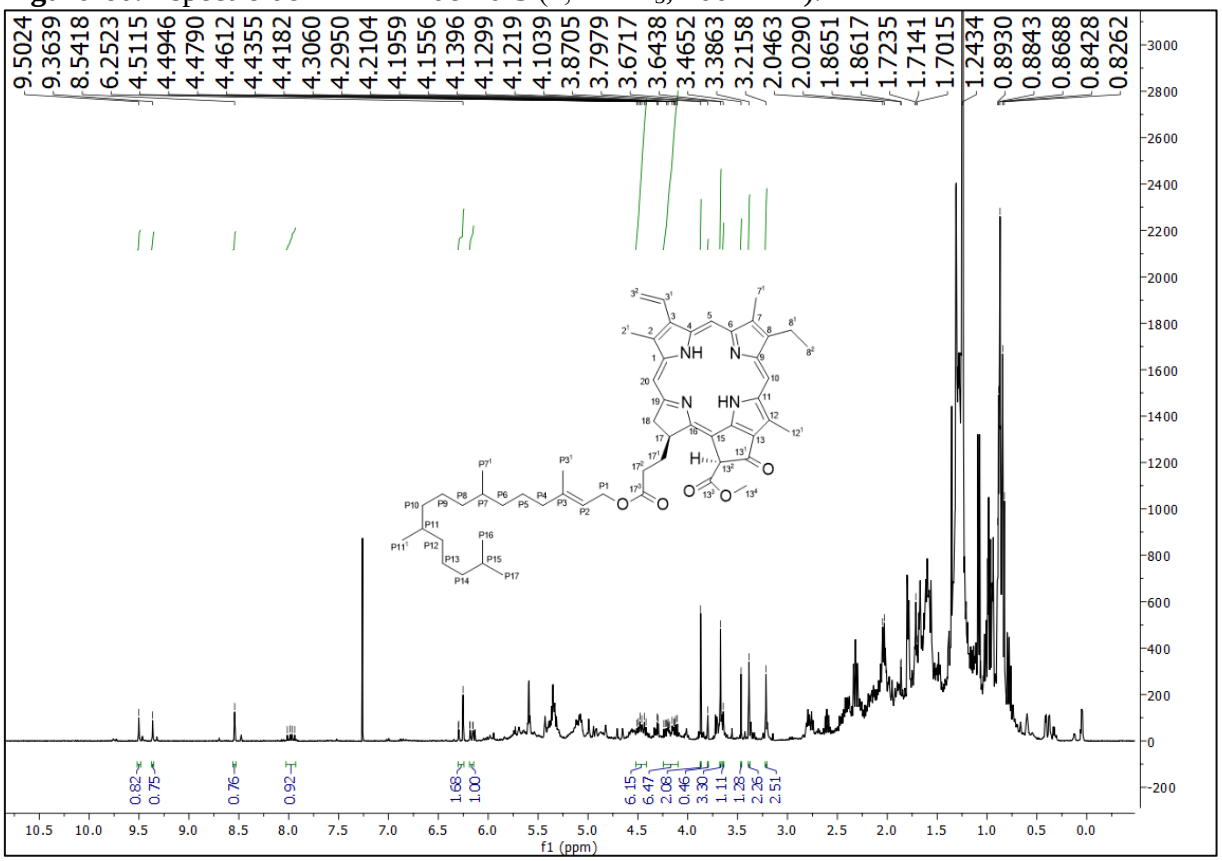


**Figura 61.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-3 na região entre 7,9 e 9,5 ppm (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).

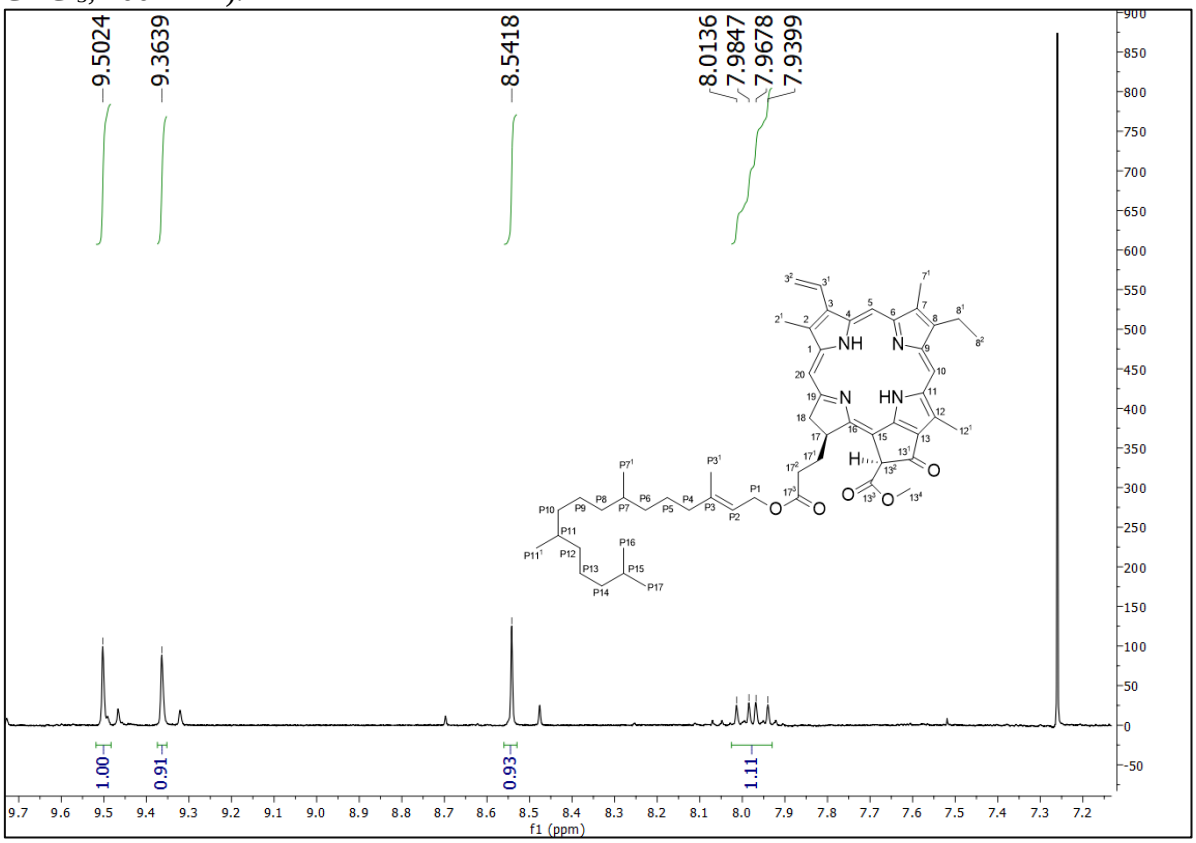



**Figura 62.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-3 na região entre 3,2 e 3,9 ppm (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).

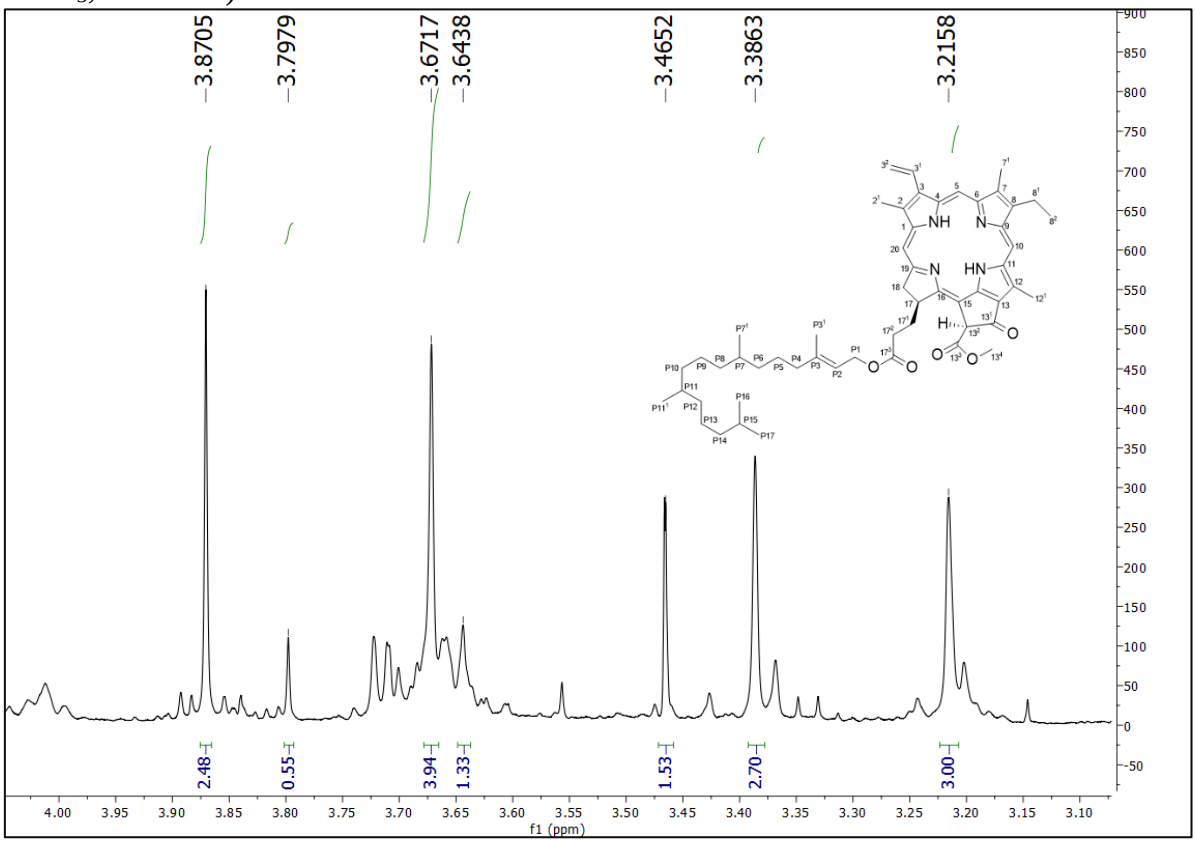


**Figura 63.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-3 na região entre 6,1 e 6,3 ppm (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).

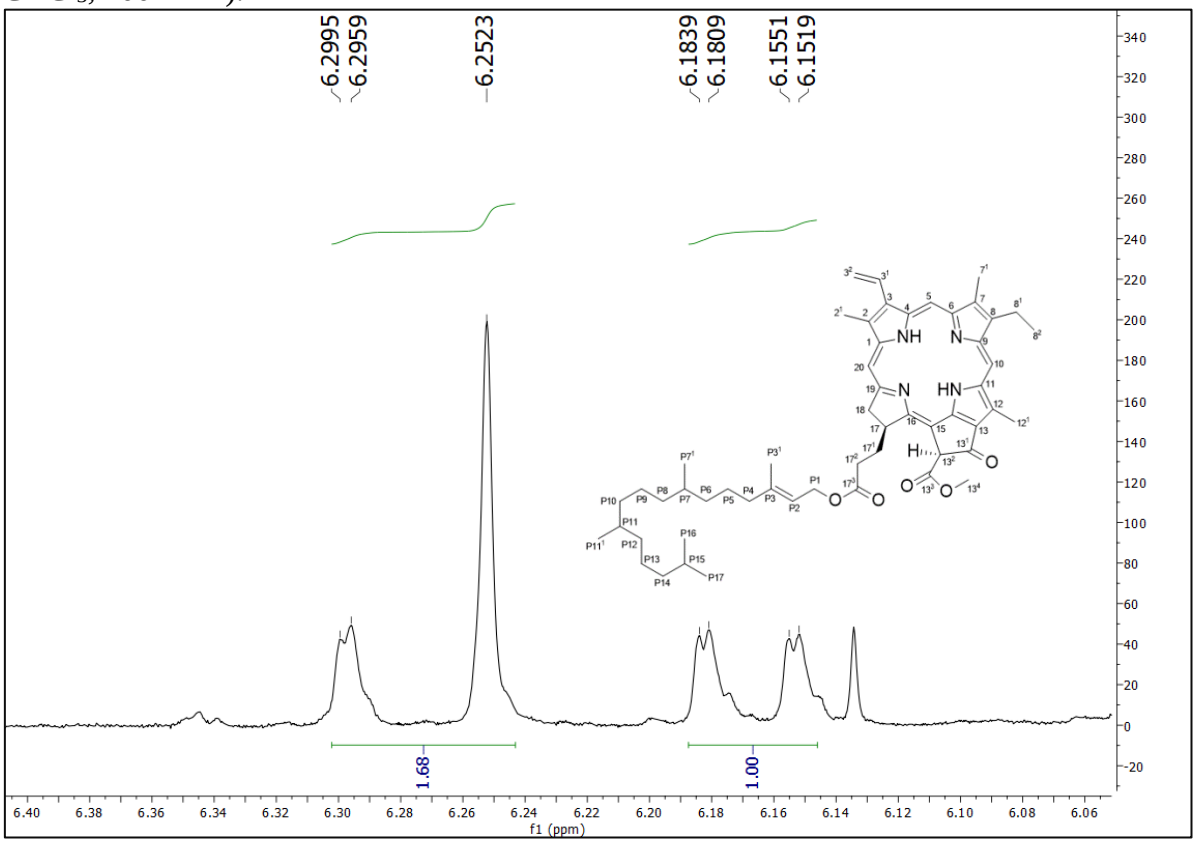
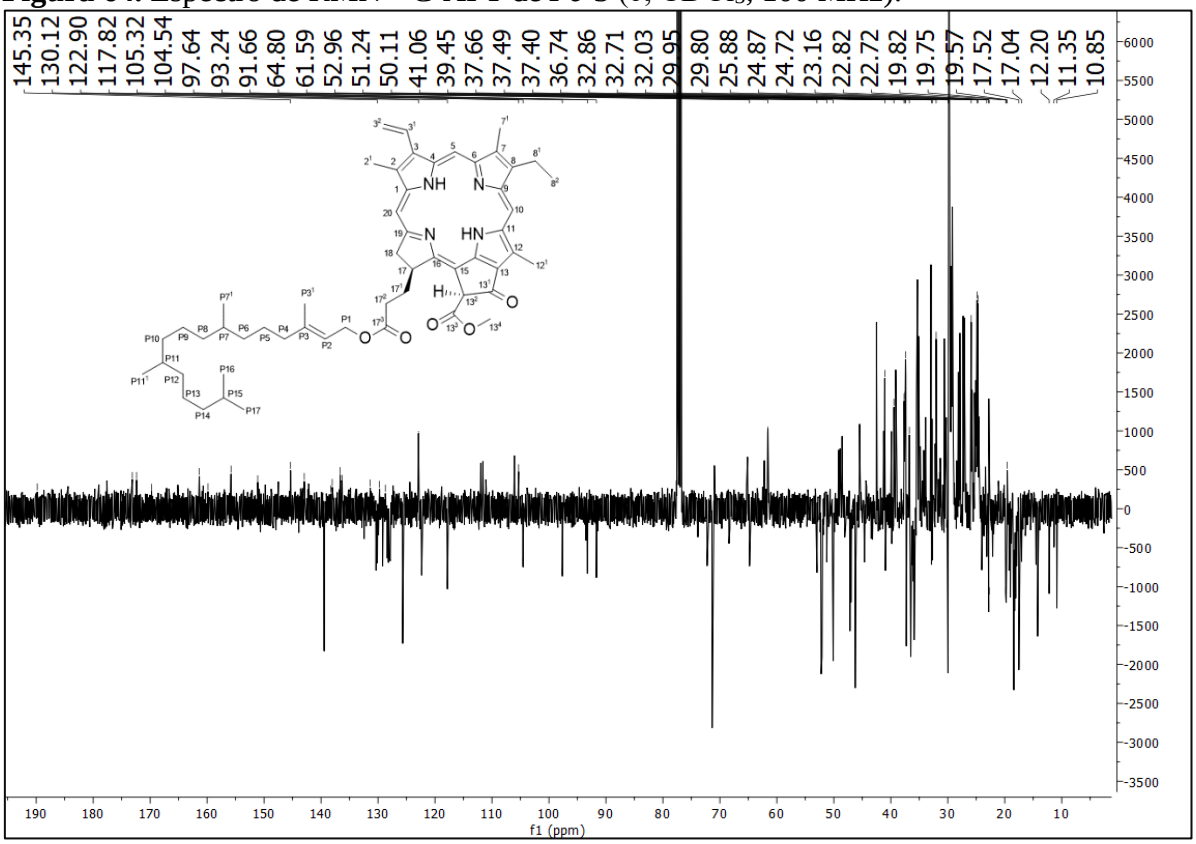



**Figura 64.** Espectro de RMN $^{13}C$-APT de *Pc*-3 (δ, $CDCl_3$, 100 MHz).



### 5.4.4 Determinação estrutural de *Pc*-4

As substâncias codificadas como *Pc*-4a e *Pc*-4b apresentaram-se como um sólido amorfo verde escuro. O espectro de RMN $^{1}H$ foi obtido a 500 MHz em $CDCl_3$ (Figura 68, pág. 136). Seu espectro de RMN $^{1}H$ e suas expansões também apresentaram sinais característicos de substâncias com núcleo porfirínico assim como em *Pc*-3, sendo estes sinais agora duplicados, levando à proposição de que se trataria de uma possível mistura de duas feofitinas.

Dessa forma, evidenciaram-se seis sinais referentes aos hidrogênios olefínicos do anel porfirínico em $\delta_H$ 9,63 e $\delta_H$ 9,61 (H-10 de *Pc*-4a e *Pc*-4b, respectivamente), $\delta_H$ 9,49 e $\delta_H$ 9,46 (H-5 de *Pc*-4a e *Pc*-4b, respectivamente), $\delta_H$ 8,62 e $\delta_H$ 8,65 (H-20 de *Pc*-4a e *Pc*-4b, respectivamente) (Figura 69, pág. 136), com integral para um hidrogênio cada (FERNANDES et al., 2018).

Os hidrogênios vinílicos também foram observados em $\delta_H$ 8,03 (dd, $J$ =17,8 e 11,6 Hz) e 8,03 (dd, $J$ =17,7 e 11,7 Hz) (Figura 69, pág. 136) para os hidrogênios (H-$3^1$ de *Pc*-4a e *Pc*-4b, respectivamente), sinais em $\delta_H$ 6.34 (*trans*) (d, $J$ =17,9 Hz) e 6,31 (*trans*) (d, $J$ =17,9 Hz) para os hidrogênios (*Ha*-$3^2$ de *Pc*-4a e *Pc*-4b, respectivamente) e 6,22 (*cis*) (d, $J$ =11,5 Hz) e 6,20 (*cis*) (d, $J$ =11,5 Hz) para os hidrogênios (*Hb*-$3^2$ de *Pc*-4a e *Pc*-4b, respectivamente) (Figura 71, pág. 137) (CHAVES et al., 2013).

Seis simpletos foram atribuídos aos hidrogênios das metilas olefínicas $\delta_H$ 3,74 e $\delta_H$ 3,72 para os H-$12^1$ de *Pc*-4a e *Pc*-4b, respectivamente), $\delta_H$ 3,44 e $\delta_H$ 3,43 para os H-$2^1$ de *Pc*-4a e *Pc*-4b, respectivamente), $\delta_H$ 3,28 e $\delta_H$ 3,27 (H-$7^1$ de *Pc*-4a e *Pc*-4b, respectivamente) (Figura 70, pág. 137), com integral para três hidrogênios cada, sendo hidrogênios metílicos na posição C-$7^1$ do núcleo de uma feofitina *a* (TELES et al., 2015).

Assim como em *Pc*-3 há a presença de um grupo fitil éster em sua estrutura química na posição C-$17^3$, devido a existência de um envelope de sinais para hidrogênios metílicos, metilênicos e metínicos entre $\delta_H$ 0,8 e $\delta_H$ 1,7 ppm (Figura 67, pág. 135) (BRITO-FILHO et al., 2017), fortalecendo a proposta do composto em se tratar de um derivado da feofitina *a*.

A ausência de um simpleto em $\delta_H$ 6,25 ppm no espectro de RMN $^{1}H$ referente ao H-$13^2$ (Figura 71, pág. 137) em *Pc*-4a e *Pc*-4b permitiu sugerir que a diferença entre *Pc*-4a e *Pc*-4b de *Pc*-3 encontrava-se na posição C-$13^2$ e que esse hidrogênio estaria substituído por uma hidroxila em *Pc*-4a e *Pc*-4b (NOGUEIRA et al., 2013).

Os dados espectrais de RMN $^{13}C$ utilizando a técnica APT (Figura 72, pág. 138)

e suas expansões apresentaram sinais duplicados confirmando as sugestões de se tratar de uma mistura de feofitinas. Os sinais semelhantes de RMN $^{13}$C entre *Pc*-3 e *Pc*-4a e *Pc*-4b permitiram propor que *Pc*-4a e *Pc*-4b tratavam-se da feofitina *a*, mas como havia a ausência de um sinal de carbono em $\delta_C$ 64,8 ppm, referente ao carbono oximetínico C-13$^2$ presente em *Pc*-3 corroborou a hipótese de que *Pc*-4a e *Pc*-4b se referiam a uma feofitina *a* hidroxilada (GOMES et al., 2015).

A presença de uma absorção em $\delta_C$ 192,3 e $\delta_C$ 192,2 corrobora com a presença do grupo cetônico (C=O) em C-13$^1$ de *Pc*-4a e *Pc*-4b, respectivamente (Figura 72, pág. 138), além de sinais em $\delta_C$ 89,1 e $\delta_C$ 89,0 (C-13$^2$ de *Pc*-4a e *Pc*-4b, respectivamente), permitindo confirmar um anel porfirínico do tipo ciclopentanona com a presença da hidroxila em C-13$^2$ de ambos os compostos (TELES et al. 2015; MACIEL et al 2016; BRITO-FILHO et al, 2017; FERNANDES et al., 2018).

A presença do envelope de absorções para o grupo fitil éster (Figura 67, pág. 135), juntamente com as referências para o núcleo porfirínico da feofitina *a*, sugeridas pelos dados espectrais de RMN $^1$H foram confirmadas pela compilação dos dados espectrais de RMN $^{13}$C correspondentes (Tabela 17, pág. 135).

Após análise dos espectros de RMN $^1$H e RMN $^{13}$C de *Pc*-4a e *Pc*-4b comparados com dados da literatura (Tabela 16, pág. 133) foi possível identificá-los como uma mistura dos isômeros ópticos *R* e *S*: 13$^2$-hidroxi-(13$^2$-*R*)-feofitina *a* (Figura 65, pág. 132) e 13$^2$-hidroxi-(13$^2$-*S*)-feofitina *a* (Figura 66, pág. 132). Estes compostos já foram isolados em espécies de Malvaceae (TELES et al., 2015; GOMES et al., 2015; FERNANDES et al., 2018; OLIVEIRA et al., 2025) e pela primeira vez na espécie em estudo.

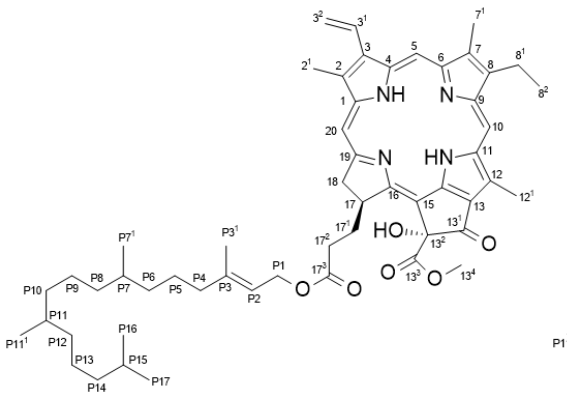


**Figura 65.** 13$^2$-hidroxi-(13$^2$-*R*)-feofitina *a*

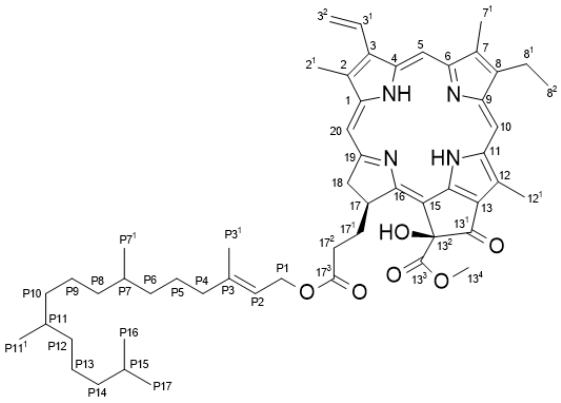


**Figura 66.** 13$^2$-hidroxi-(13$^2$-*S*)-feofitina *a*

**Tabela 16.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-4a** e ***Pc*-4b** (δ, $CDCl_3$, 500 e 125 MHz) com o modelo ***Mo*-1a** e ***Mo*-1b** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) (FERNANDES, et al., 2018).

| C | ***Mo*-1a** | | ***Pc*-4a** | | ***Mo*-1b** | | ***Pc*-4b** | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** |
| **1** | - | 142,20 | - | 142,20 | - | 142,10 | - | 142,10 |
| **2** | - | 132,00 | - | 132,30 | - | 131,80 | - | 131,80 |
| **2¹** | 3,40 (s) | 12,20 | 3,44 (s) | 12,10 | 3,39 (s) | 12,20 | 3,43 (s) | 12,00 |
| **3** | - | 136,50 | - | 136,60 | - | 136,50 | - | 136,50 |
| **3¹** | 7,98 (dd, *J* =17,6 e 11,4 Hz) | 129,10 | 8,03 (dd, *J* =17,8 e 11,6 Hz) | 129,10 | 7,98 (dd, *J* =17,6 e 11,4 Hz) | 129,10 | 8,03 (dd, *J* =17,7 e 11,7 Hz) | 129,10 |
| **3²** | 6,27 (*trans*) (d, *J* =17,8 Hz) e 6,17 (*cis*) (d, *J* =11,5 Hz) | 122,90 | 6,34 (*trans*) (d, *J* =17,9 Hz) e 6,22 (*cis*) (d, *J* =11,5 Hz) | 122,90 | 6,27 (*trans*) (d, *J* =17,8 Hz) e 6,17 (*cis*) (d, *J* =11,5 Hz) | 122,90 | 6,31 (*trans*) (d, *J* =17,9 Hz) e 6,20 (*cis*) (d, *J* =11,5 Hz) | 122,90 |
| **4** | - | 136,40 | - | 136,40 | - | 136,30 | - | 136,30 |
| **5** | 9,37 (s) | 98,00 | 9,49 (s) | 98,00 | 9,34 (s) | 97,90 | 9,46 (s) | 97,90 |
| **6** | - | 155,60 | - | 155,63 | - | 155,40 | - | 155,41 |
| **7** | - | 136,30 | - | 136,30 | - | 136,30 | - | 136,44 |
| **7¹** | 3,17 (s) | 11,30 | 3,28 (s) | 11,30 | 3,16 (s) | 11,20 | 3,27 (s) | 10,70 |
| **8** | - | 145,30 | - | 145,70 | - | 145,20 | - | 145,30 |
| **8¹** | 3,65 (sl) | 19,80 | 3,64 (s) | 19,80 | 3,63 (s) | 19,70 | 3,62 (s) | 19,70 |
| **8²** | 1,70 (m) | 16,40 | 1,74 (m) | 16,95 | 1,70 (m) | 16,30 | 1,74 (m) | 16,90 |
| **9** | - | 151,10 | - | 151,10 | - | 151,00 | - | 151,00 |
| **10** | 9,53 (s) | 104,30 | 9,63 (s) | 104,30 | 9,49 (s) | 104,30 | 9,61 (s) | 104,30 |
| **11** | - | 137,90 | - | 137,80 | - | 137,80 | - | 137,16 |
| **12** | - | 129,60 | - | 129,66 | - | 129,40 | - | 129,40 |

| | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| **12[1]** | 3,72 (s) | 12,40 | 3,74 (s) | 12,30 | 3,69 (s) | 12,40 | 3,72 (s) | 12,10 |
| **13** | - | 127,00 | - | 127,10 | - | 126,30 | - | 126,80 |
| **13[1]** | - | 192,20 | - | 192,30 | - | 192,20 | - | 192,20 |
| **13[2]** | - | 89,20 | - | 89,10 | - | 89,10 | - | 89,00 |
| **13[3]** | - | 173,50 | - | 173,70 | - | 172,90 | - | 172,80 |
| **13[4]** | 3,65 (s) | 53,90 | 3,64 (s) | 53,80 | 3,63 (s) | 53,50 | | 53,40 |
| **14** | - | 149,90 | - | 149,90 | - | 150,30 | - | 150,50 |
| **15** | - | 107,80 | - | 107,90 | - | 107,80 | - | 107,70 |
| **16** | - | 162,00 | - | 162,50 | - | 162,60 | - | 163,10 |
| **17** | 4,57 (m) | 51,90 | 4,59 (m) | 51,90 | 4,17 (dl, *J* =9,8 Hz) | 51,90 | 4,16 (m) | 51,80 |
| **17[1]** | - | 32,00 | - | 31,90 | - | 31,70 | - | 31,60 |
| **17[2]** | - | 31,30 | - | 31,30 | - | 31,20 | - | 31,10 |
| **17[3]** | - | 172,10 | - | 172,50 | - | 173,00 | - | 173,10 |
| **18** | - | 50,40 | - | 50,30 | - | 50,30 | - | 50,00 |
| **18[1]** | 1,60 (m) | 22,80 | 1,63 (m) | 22,70 | 1,60 (m) | 22,70 | 1,63 (m) | 22,60 |
| **19** | - | 172,30 | - | 172.60 | - | 172,30 | - | 172,40 |
| **20** | 8,60 (s) | 93,70 | 8,62 (s) | 93.70 | 8,63 (s) | 93,50 | 8,65 (s) | 93,40 |

**Tabela 17.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-4a** e ***Pc*-4b** (δ, $CDCl_3$, 500 e 125 MHz) com o modelo ***Mo*-1a** e ***Mo*-1b** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) (FERNANDES, et al., 2018).

| C | ***Mo*-1a** | ***Pc*-4a** | ***Mo*-1b** | ***Pc*-4b** |
|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_C$** | **$\delta_C$** | **$\delta_C$** | **$\delta_C$** |
| **P1** | 61,51 | 61,40 | 61,72 | 61,60 |
| **P2** | 117,84 | 117,70 | 117,99 | 117,90 |
| **P3** | 143,01 | 143,22 | 142,91 | 142,80 |
| **P4** | 39,95 | 39,80 | 39,91 | 39,80 |
| **P5** | 25,13 | 25,16 | 25,10 | 25,01 |
| **P6** | 36,77 | 36,65 | 36,74 | 36,62 |
| **P7** | 32,88 | 32,80 | 32,86 | 32,75 |
| **P8** | 37,51 | 37,55 | 37,49 | 37,45 |
| **P9** | 24,54 | 24,76 | 24,52 | 24,80 |
| **10** | 37,44 | 37,40 | 37,41 | 37,36 |
| **P11** | 32,75 | 32,62 | 32,72 | 32,60 |
| **P12** | 37,38 | 37,32 | 37,36 | 37,30 |
| **P13** | 24,89 | 24,89 | 24,89 | 24,86 |
| **P14** | 39,47 | 39,35 | 39,47 | 39,40 |
| **P15** | 28,08 | 28,00 | 28,08 | 27,95 |
| **P16** | 22,78 | 22,00 | 22,78 | 21,87 |
| **P17** | 22,74 | 22,61 | 22,74 | 22,63 |
| **$P11^1$** | 19,84 | 19,75 | 19,78 | 19,72 |
| **$P7^1$** | 22,83 | 23,17 | 22,83 | 22,72 |
| **$P3^1$** | 17,53 | 17,46 | 17,53 | 17,43 |

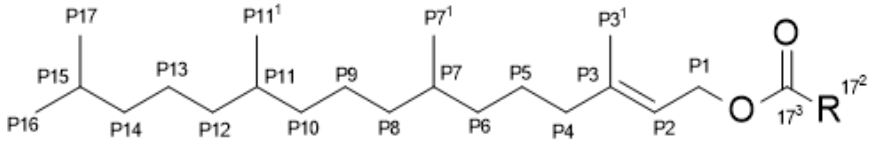



**Figura 67.** Radical fitil.

**Figura 68.** Espectro de RMN $^{1}H$ *Pc*-4 (δ, $CDCl_3$, 500 MHz).

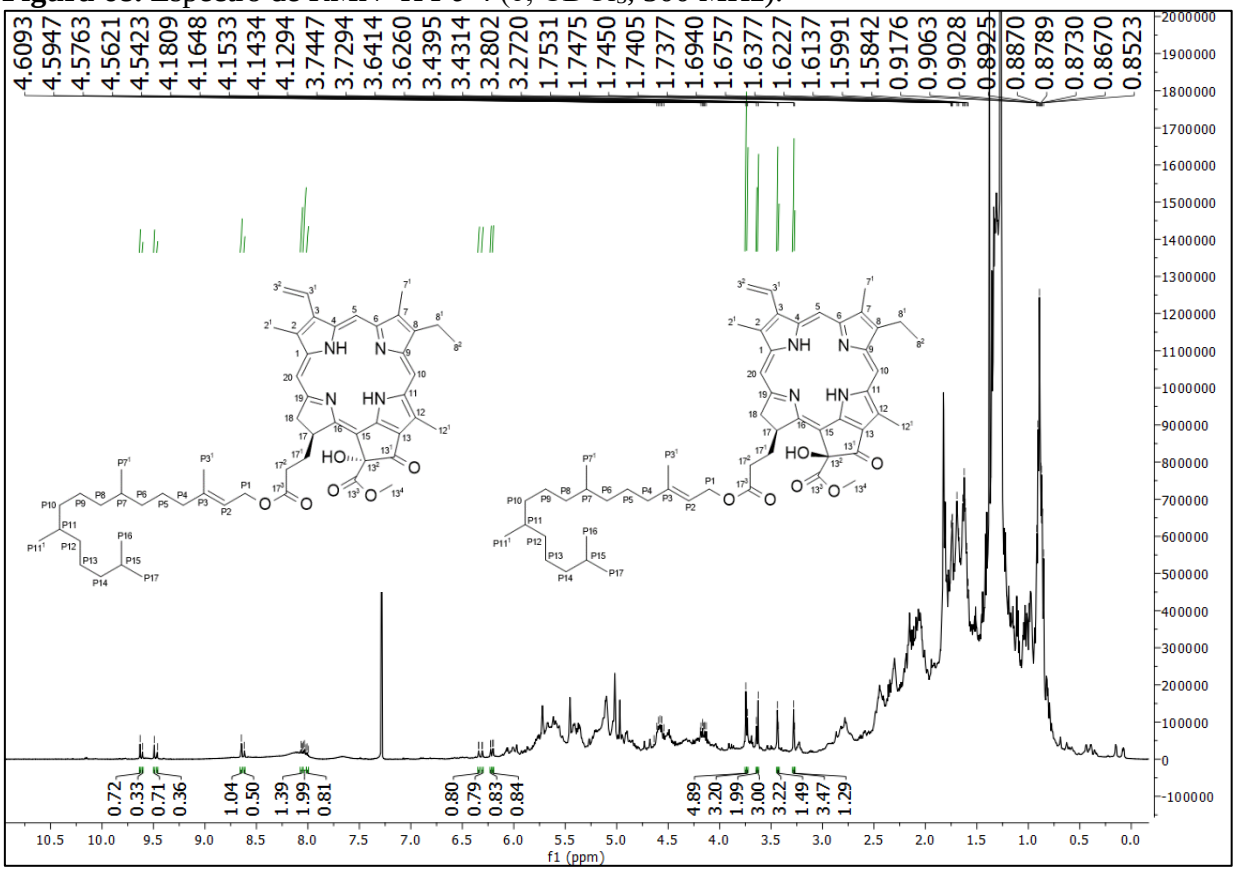



**Figura 69.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ *Pc*-4 na região entre 7,9 e 9,6 ppm (δ, $CDCl_3$, 500 MHz).

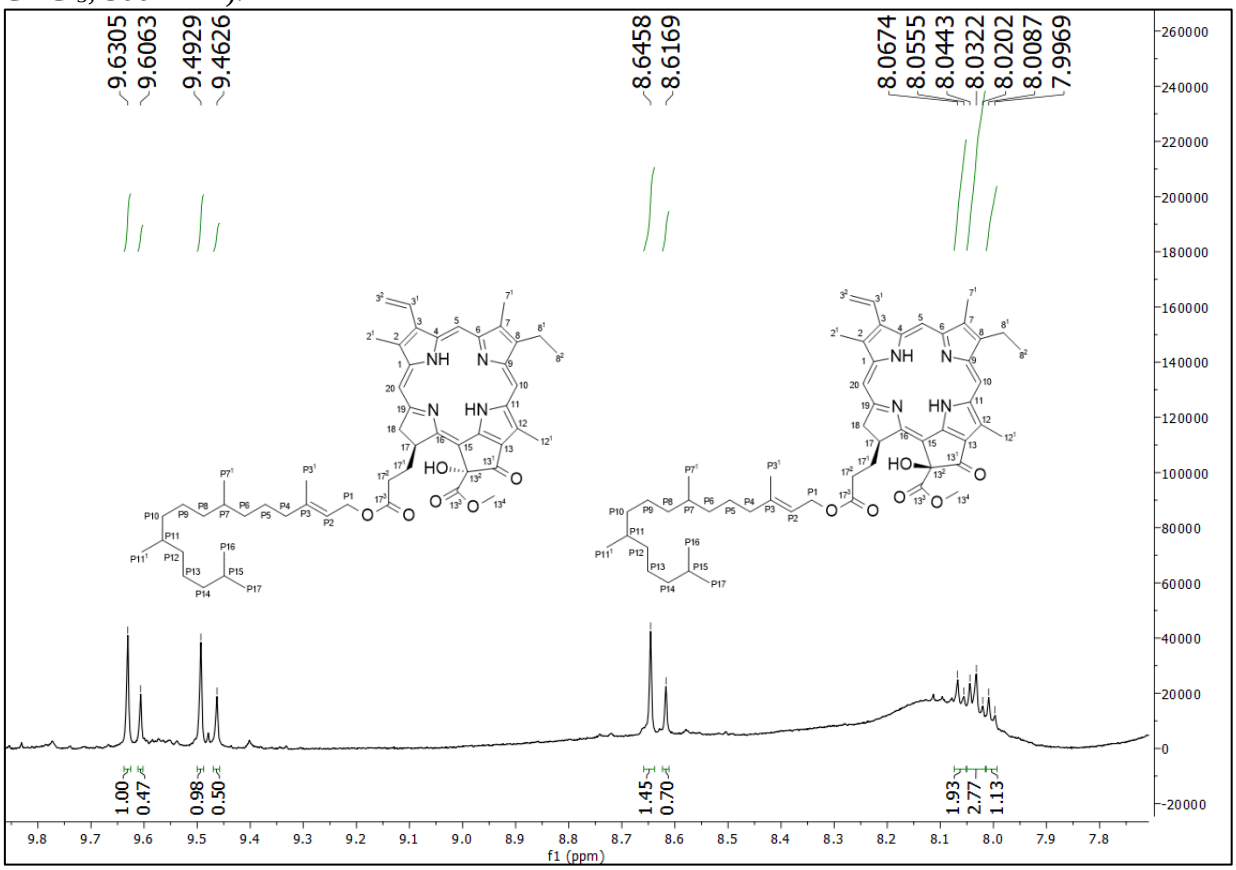


**Figura 70.** Expansão do espectro de RMN $^{1}$H *Pc*-4 na região entre 3,2 e 3,7 ppm (δ, $CDCl_3$, 500 MHz).

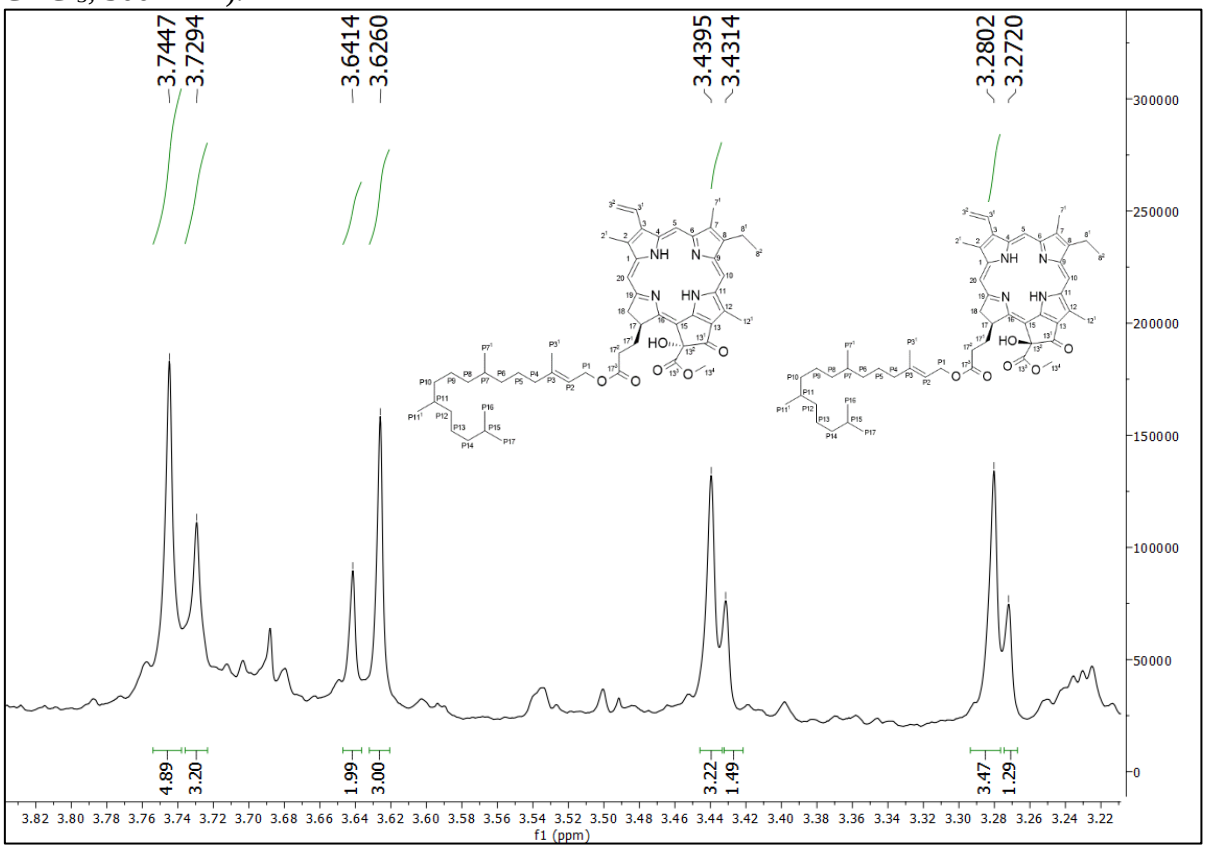



**Figura 71.** Expansão do espectro de RMN $^{1}$H *Pc*-4 na região entre 6,1 e 6,3 ppm (δ, $CDCl_3$, 500 MHz).

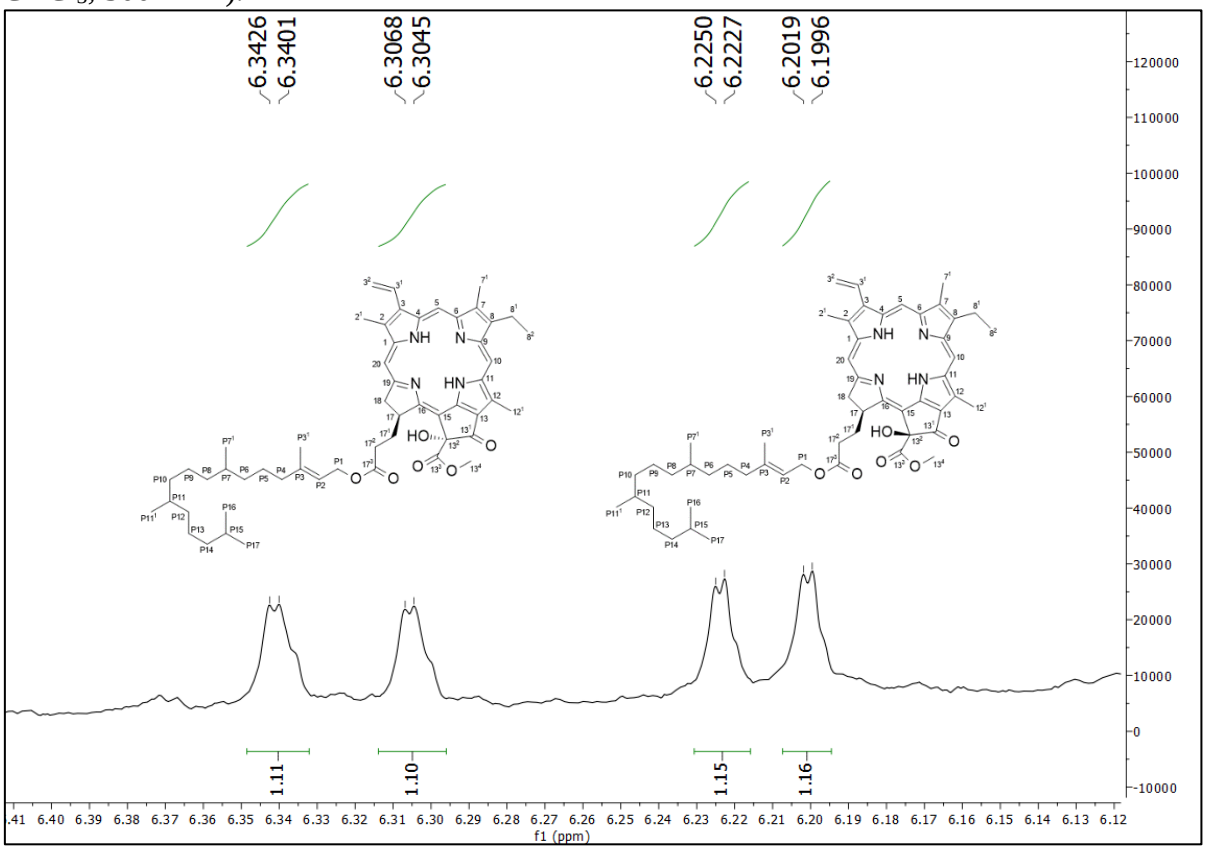
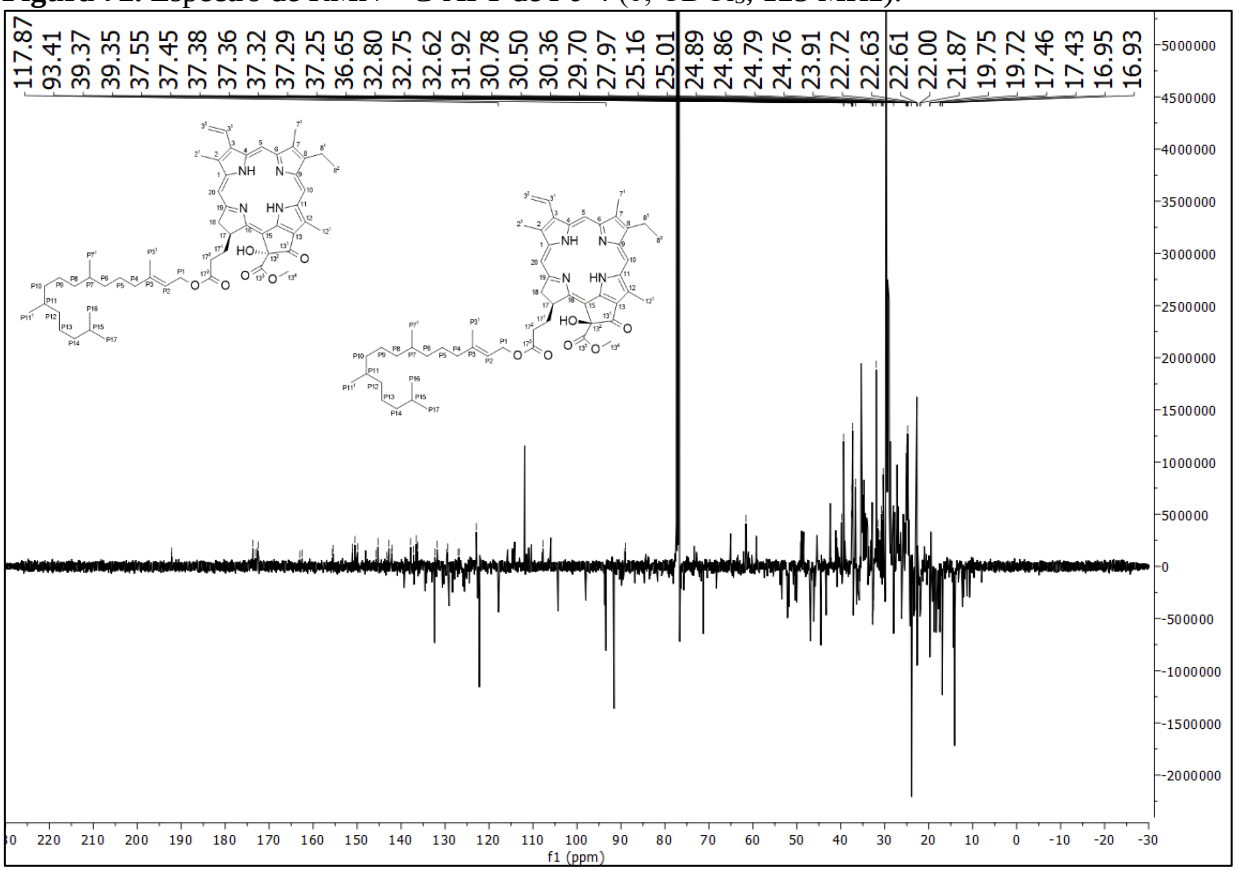


**Figura 72.** Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-4 (δ, $CDCl_3$, 125 MHz).




### 5.4.5 Determinação estrutural de *Pc*-5

A substância codificada como *Pc*-5 apresentou-se como um pó amarelado. Seu espectro de RMN $^1$H foi obtido a 500 MHz em $CDCl_3$ (Figura 74, pág. 139).

O espectro de RMN $^1$H e suas expansões revelaram a presença de um simpleto intenso em $\delta_H$ 12,49 ppm (Figura 74, pág. 141), condizente a um hidrogênio de hidroxila fenólica que forma uma ponte intramolecular de hidrogênio entre o grupo -OH em C-5 do anel A e a carbonila em C-4 do anel C, característica bastante encontrada em flavonoides (FERREIRA, et al., 2019).

Uma análise da expansão deste espectro (Figura 75, pág. 140) mostra sinais referentes a dois duplos dupletos em $\delta_H$ 8,16 ($J$ =7,1 e 2,1 Hz) e $\delta_H$ 7,05 ($J$ =7,1 e 2,1 Hz), integrando para dois hidrogênios cada, caracterizando um acoplamento *orto* e *meta* atribuídos aos conjuntos de hidrogênios H-2'/H-6' e H-3'/H-5', respectivamente (Figura 74, pág. 141) demonstrando assim a presença de um sistema AA'BB', sugerindo para *Pc*-5 um esqueleto do tipo flavonoídico com anel B *para* substituído (CHAVES et al., 2017).

Os sinais evidenciados no RMN $^1$H indicam que a molécula de *Pc*-5 possuía o

anel A pentassubstituído, uma vez que não foram observados dupletos para os hidrogênios desse anel, apenas um simpleto em $\delta_H$ 6,42 ppm condizente ao hidrogênio H-6 do anel A (Figura 75, pág. 141). A ausência de outro simpleto em aproximadamente $\delta_H$ 6,80 ppm condiz que a posição C-3 do anel C de flavonas encontrava-se substituída (ALBUQUERQUE et al., 2025).

Quatro sinais intensos foram observados condizentes com hidrogênios metoxílicos em $\delta_{H,}$ 3,94, $\delta_H$ 3,91, $\delta_H$ 3,90 e $\delta_H$ 3,87, integrando para 3H cada (Figura 76, pág. 142), sugerindo que este composto possui estes substituintes em sua estrutura, podendo se tratar de um flavonoide tetrametoxilado (OLIVEIRA et al., 2025).

Ao analisar o espectro de RMN $^{13}C$ e suas expansões utilizando a técnica APT foram evidenciados sinais para dezenove átomos de carbono atribuídos aos carbonos do núcleo flavona. Sinais em $\delta_C$ 130,4 e $\delta_C$ 114,3 fortaleceram a presença de um sistema AA'/BB' condizentes para os conjuntos de carbonos C-2'/6' e C-3'/5', respectivamente do anel B de flavonoides (Figura 77, pág. 142) (FERREIRA, et al., 2019).

Uma absorção em $\delta_C$ 179,2 foi atribuída ao carbono de carbonila na posição C-4 do anel C de flavonoides (Figura 77, pág. 142). A presença dos sinais em $\delta_C$ 60,3, $\delta_C$ 56,5, $\delta_C$ 61,8 e $\delta_C$ 55,6 confirmou a proposta realizada no RMN $^1H$ por meio da presença de metoxilas ligadas ao flavonoide nas posições C-3, C-7, C-8 e C-4', respectivamente (OLIVEIRA et al., 2025).

A análise dos dados espectrais de RMN $^1H$ e RMN $^{13}C$ de *Pc*-5 (Tabela 18, pág. 140) levou à identificação do composto como sendo a 5,7-dihidroxi-3,7,8,4'-tetrametoxiflavona (Figura 73, pág. 139), composto este isolado anteriormente na espécie *Pavonia glazioviana* (OLIVEIRA et al., 2025) e pela primeira vez na espécie em estudo.

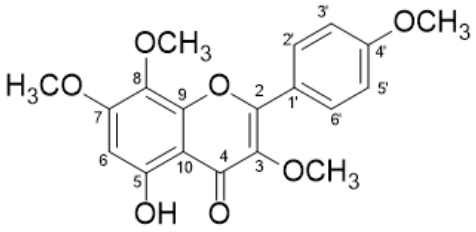



**Figura 73.** 5,7-dihidroxi-3,7,8,4'-tetrametoxiflavona

**Tabela 18.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-5** (δ, $CDCl_3$, 500 e 125 MHz) com modelo da literatura ***Mo*-1** (TELES et al., 2015) e ***Mo*-2** (OLIVEIRA et al., 2025).

| C | ***Mo*-1 (5,8-dihidroxi-7,4'-dimetoxiflavona)** | | ***Mo*-2** | | ***Pc*-5** | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** |
| **2** | - | 164,00 | - | 156,08 | - | 156,08 |
| **3** | 6,87 (1H, s) | 103,60 | - | 138,79 | - | 138,77 |
| **4** | - | 182,90 | - | 179,04 | - | 179,20 |
| **5** | - | 153,10 | 12,49 (1H, s) | 157,53 | 12,49 (s) | 157,51 |
| **6** | 6,56 (1H, s) | 96,20 | 6,42 (1H, s) | 95,56 | 6,42 (s) | 95,56 |
| **7** | - | 154,80 | - | 158,34 | - | 158,49 |
| **8** | - | 126,80 | - | 128,86 | - | 129,00 |
| **9** | - | 145,00 | - | 150,49 | - | 148,64 |
| **10** | - | 104,40 | - | 105,54 | - | 105,51 |
| **1'** | - | 123,50 | - | 123,16 | - | 123,12 |
| **2'** | 8,12 (2H, d, *J* =8,1 Hz) | 129,00 | 8,16 (2H, dd, *J* =2,0 e 9,2 Hz) | 130,40 | 8,16 (dd, *J* =7,0 e 2,0 Hz) | 130,40 |
| **3'** | 7,13 (2H, d, *J* =8,6 Hz) | 115,10 | 7,05 (2H, dd, *J* =2,0 e 9,2 Hz) | 114,35 | 7,05 (dd, *J* =7,1 e 2,1 Hz) | 114,33 |
| **4'** | - | 162,90 | - | 161,93 | - | 161,94 |
| **5'** | 7,13 (2H, d, *J* =8,6 Hz) | 115,10 | 7,05 (2H, dd, *J* =2,0 e 9,2 Hz) | 114,35 | 7,05 (dd, *J* =7,1 e 2,1 Hz) | 114,33 |
| **6'** | 8,12 (2H, d, *J* =8,1 Hz) | 129,00 | 8,16 (2H, dd, *J* =2,0 e 9,2 Hz) | 130,40 | 8,16 (dd, *J* =7,0 e 2,0 Hz) | 130,40 |
| **3-$OCH_3$** | - | - | 3,87 (3H, s) | 60,28 | 3,87 (s) | 60,28 |
| **7- $OCH_3$** | 3,90 (3H, s) | 56,90 | 3,95 (3H, s) | 56,53 | 3,94 (s) | 56,52 |
| **8-$OCH_3$** | - | - | 3,91 (3H, s) | 61,78 | 3,91 (s) | 61,79 |
| **4'-$OCH_3$** | 3,86 (3H, s) | 56,10 | 3,90 (3H, s) | 55,56 | 3,90 (s) | 55,59 |

**Figura 74.** Espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-5 (δ, $CDCl_3$, 500 MHz).

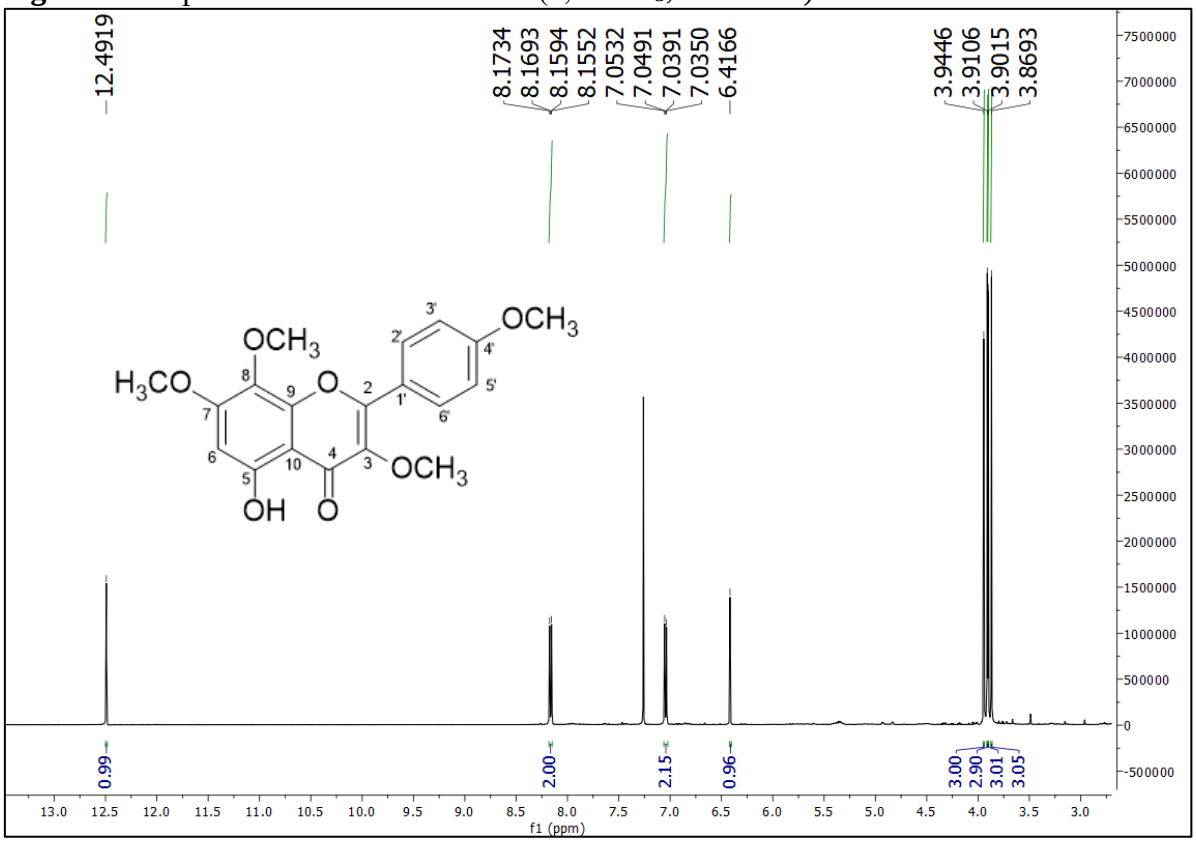



**Figura 75.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-5 na região entre 6,4 e 8,2 ppm (δ, $CDCl_3$, 500 MHz).

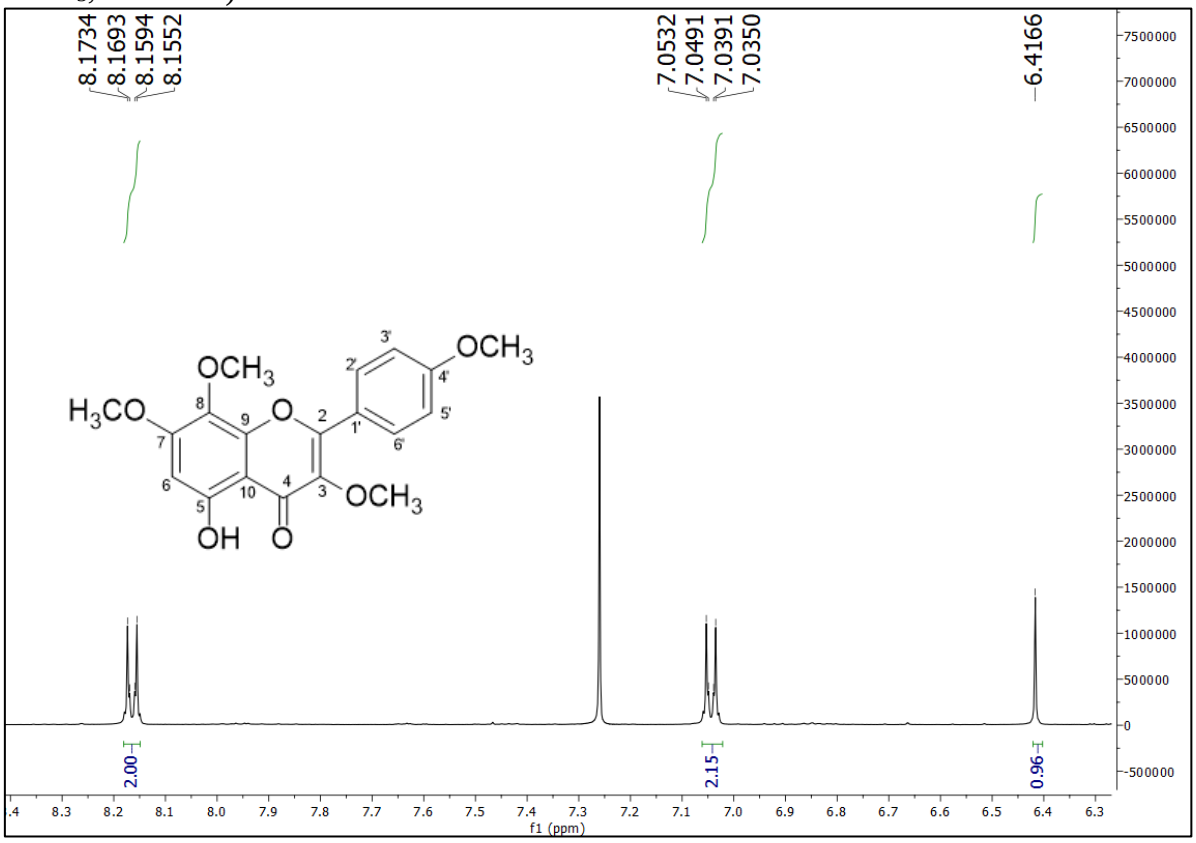


**Figura 76.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-5 na região entre 3,8 e 3,9 ppm (δ, $CDCl_3$, 500 MHz).

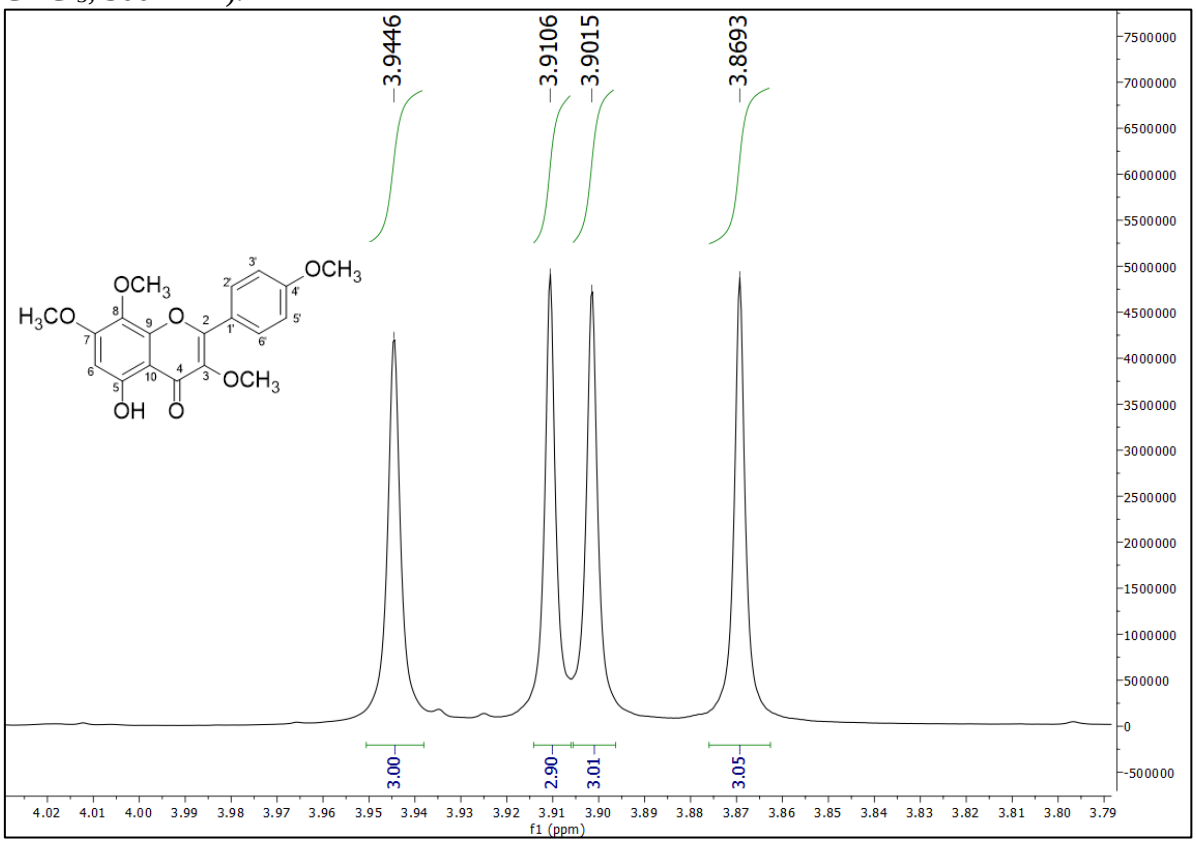
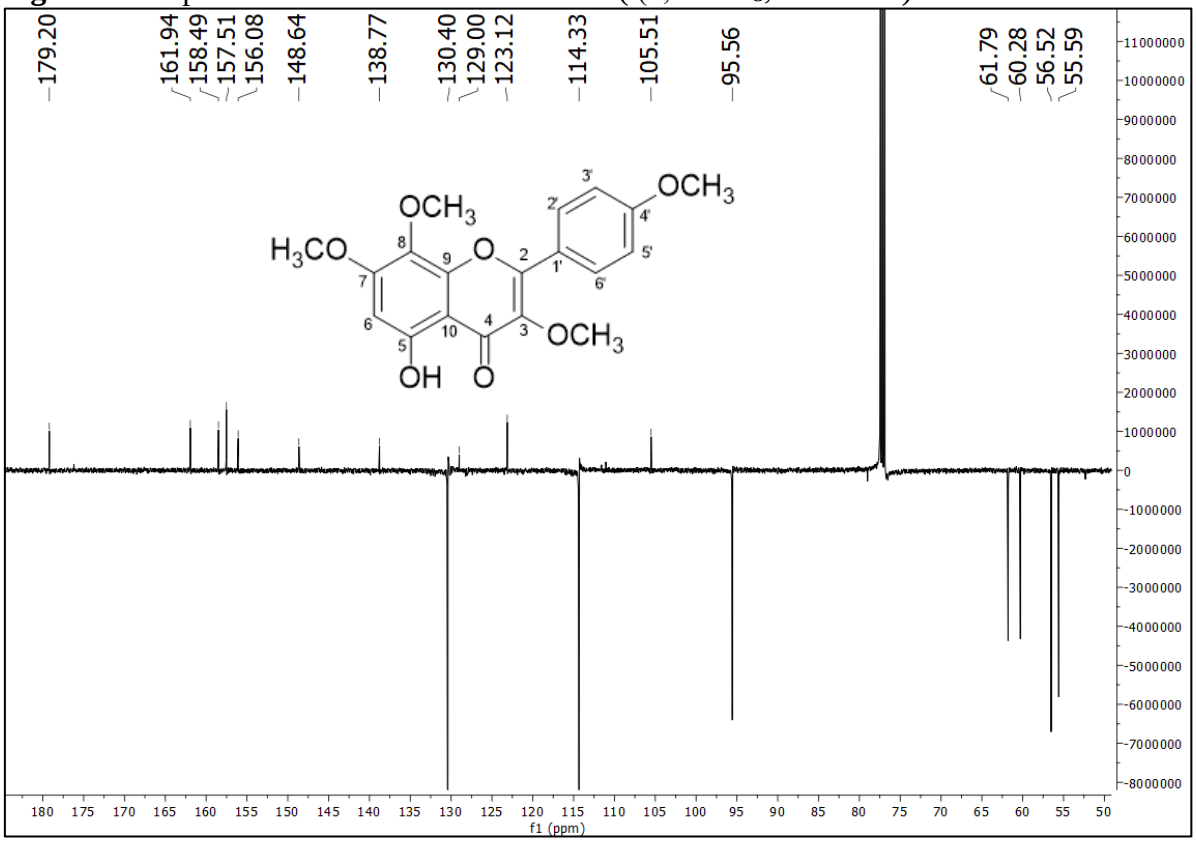



**Figura 77.** Espectro de RMN $^{13}C$-APT de *Pc*-5 ( (δ, $CDCl_3$, 125 MHz).



### 5.4.6 Determinação estrutural de *Pc*-6

A substância codificada como *Pc*-6 apresentou-se na forma de um pó amarelado. Seu espectro de RMN $^{1}H$ foi obtido a 400 MHz em $CDCl_3$ (Figura 79, pág. 145). Ao analisar suas expansões foi evidenciada a presença de um simpleto em $\delta_H$ 12,42 ppm (Figura 79, pág. 145) característico de hidrogênio de hidroxila fenólica da posição C-5 formando ligação de hidrogênio intramolecular com a carbonila em C-4 de flavonoides, assim como visto em *Pc*-5 (FERREIRA et al., 2019).

Ainda foi possível observar dois dupletos em $\delta_H$ 8,11 ($J$ =8,7 Hz) e 7,04 ($J$ =8,8 Hz), revelando um acoplamento do tipo *orto*, que demonstra a existência de um sistema AA'BB' (Figura 80, pág. 146) e, assim, sugere para *Pc*-6 um esqueleto flavonoídico com anel B *para* substituída (FERNANDES et al., 2018).

Assim como em *Pc*-5 não foi evidenciado um simpleto em $\delta_H$ 6,80 no espectro de RMN $^{1}H$, condizente com o hidrogênio da posição C-3 , o que sugere que esse carbono encontrava-se substituída (TELES et al., 2015). Apenas um simpleto em $\delta_H$ 6,41 foi evidenciado, sugerindo que a posição C-6 do anel A de flavonas não se encontrava substituída. Além dessa absorção, mais três sinais em $\delta_H$, 3,86, $\delta_H$ 3,90 e $\delta_H$ 3,99, com integral para 3H cada (Figura 81, pág. 146), sugeriu se tratar de um flavonoide trimetoxilado (OLIVEIRA et al., 2025).

No espectro de RMN $^{13}C$ utilizando a técnica APT, reforça-se as informações do espectro de RMN $^{1}H$, evidenciando a presença de dezoito átomos de carbono. Os sinais intensos em $\delta_C$ 130,2 e $\delta_C$ 114,4 foram atribuídos aos carbonos C-2'/6' e C-3'/5', respectivamente, confirmando a presença do sistema AA'/BB' (Figura 82, pág. 147). Um sinal de carbono de carbonila da posição C-4 do anel C de flavonoides foi confirmado com absorção em $\delta_C$ 179,0. Os sinais intensos na região de $\delta_C$ 60,3, $\delta_C$ 62,1 e $\delta_C$ 55,6, típicos de metoxilas confirmaram a proposta do espectro de RMN $^{1}H$ que se encontrava ligados aos carbonos C-3, C-8 e C-4' (Figura 82, pág. 147) (GOMES et al., 2011; OLIVEIRA et al., 2025).

A análise dos dados espectrais de RMN $^{1}H$ e RMN $^{13}C$ juntamente com os dados da literatura (Tabela 19, pág. 144), permitiu identificar *Pc*-6 como sendo um flavonoide 5,7-dihidroxi-3,8,4'-trimetoxiflavona (Figura 78, pág. 144), composto isolado anteriormente em espécies da família Malvaceae *Pavonia glazioviana* (OLIVEIRA et al., 2025) e *Pavonia malacophylla* (ALBUQUERQUE et al., 2025) e pela primeira vez na espécie em estudo.

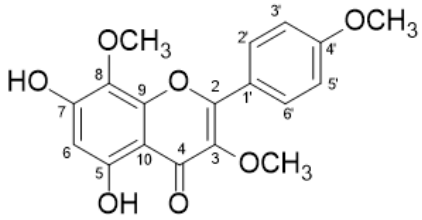



**Figura 78.** 5,7-dihidroxi-3,8,4´-trimetoxiflavona

**Tabela 19.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-6** (δ, $CDCl_3$, 500 e 125 MHz) com ***Pc*-5** e com o modelo ***Mo*-1** (OLIVEIRA et al., 2025).

| C | ***Pc*-5** | | ***Mo*-1** | | ***Pc*-6** | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** |
| **2** | - | 156,08 | - | 155,08 | - | 155,75 |
| **3** | - | 138,77 | - | 138,95 | - | 138,95 |
| **4** | - | 179,20 | - | 179,04 | - | 179,04 |
| **5** | 12,49 (s) | 157,51 | 12,43 (1H, s) | 155,04 | 12,43 (s) | 155,21 |
| **6** | 6,42 (s) | 95,56 | 6,42 (1H, s) | 98,55 | 6,42 (s) | 98,62 |
| **7** | - | 158,49 | - | 155,74 | - | 157,64 |
| **8** | - | 129,00 | - | 126,81 | - | 126,91 |
| **9** | - | 148,64 | - | 148,06 | - | 148,13 |
| **10** | - | 105,51 | - | 105,81 | - | 105,78 |
| **1'** | - | 123,12 | - | 122,92 | - | 122,93 |
| **2'** | 8,16 (dd, *J* =7,0 e 2,0 Hz) | 130,40 | 8,11 (2H, d, *J* =10,0 Hz) | 130,21 | 8,11 (dd, *J* = 8,7 e 2,6 Hz) | 130,21 |
| **3'** | 7,05 (dd, *J* =7,1 e 2,1 Hz) | 114,33 | 7,05 (2H, d, *J* = 9,0 Hz) | 114,39 | 7,05 (dd, *J* = 8,7 e 2,6 Hz) | 114,39 |
| **4'** | - | 161,94 | - | 161,93 | - | 161,94 |
| **5'** | 7,05 (dd, *J* =7,1 e 2,1 Hz) | 114,33 | 7,05 (2H, d, *J* = 9,0 Hz) | 114,39 | 7,05 (dd, *J* = 8,7 e 2,6 Hz) | 114,39 |
| **6'** | 8,16 (dd, *J* =7,0 e 2,0 Hz) | 130,40 | 8,11 (2H, d, *J* =10,0 Hz) | 130,21 | 8,11 (dd, *J* = 8,7 e 2,6 Hz) | 130,21 |

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| **3-OCH$_3$** | 3,87 (s) | 60,28 | 3,86 (3H, s) | 60,34 | 3,86 (s) | 60,32 |
| **7-OCH$_3$** | 3,94 (s) | 56,52 | 3,99 (3H, s) | 62,10 | - | - |
| **8-OCH$_3$** | 3,91 (s) | 61,79 | - | - | 3,99 (s) | 62,06 |
| **4'-OCH$_3$** | 3,90 (s) | 55,59 | 3,90 (3H, s) | 55,61 | 3,90 (s) | 55,60 |

**Figura 79.** Espectro de RMN $^1$H de *Pc*-6 (δ, $CDCl_3$, 500 MHz).

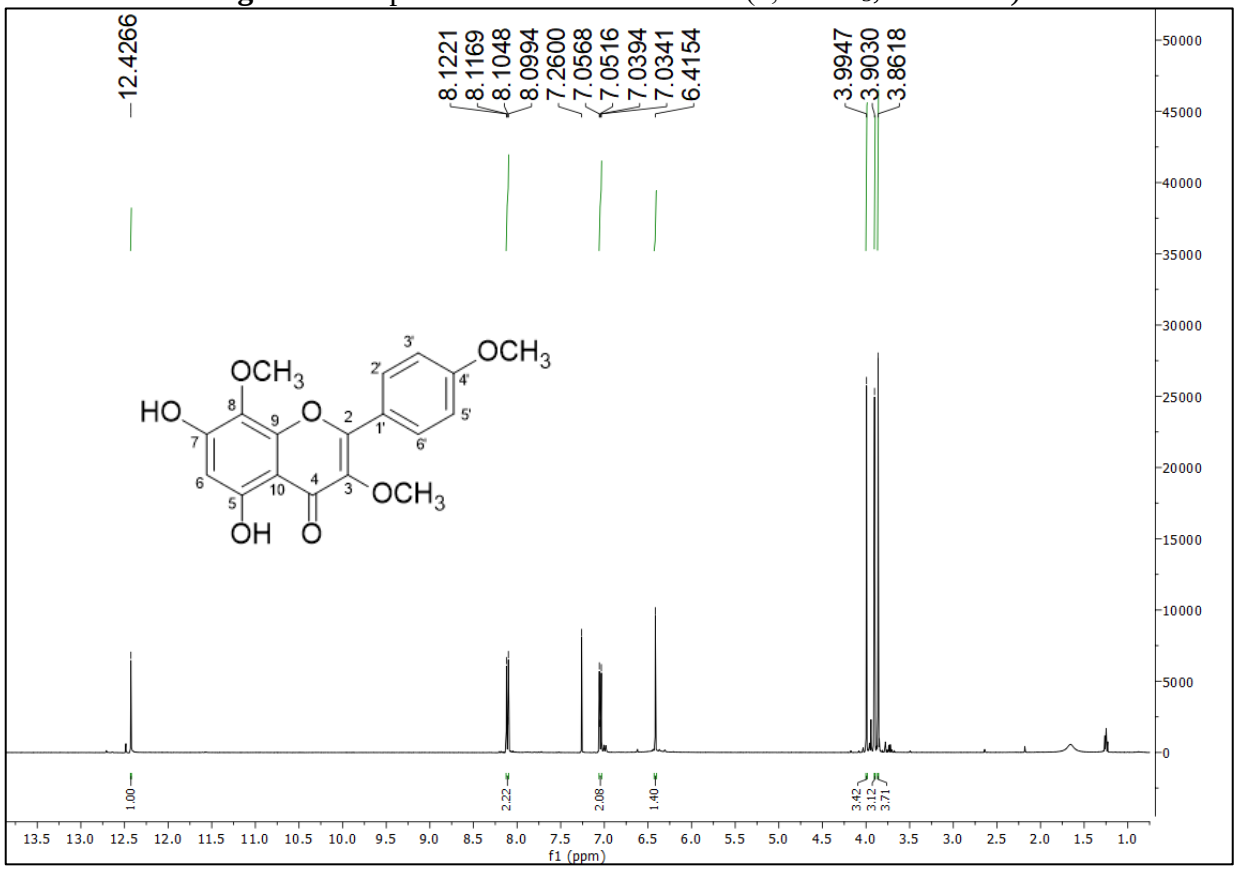


**Figura 80.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-6 na região entre 6,4 e 8,1 ppm (δ, $CDCl_3$, 500 MHz).

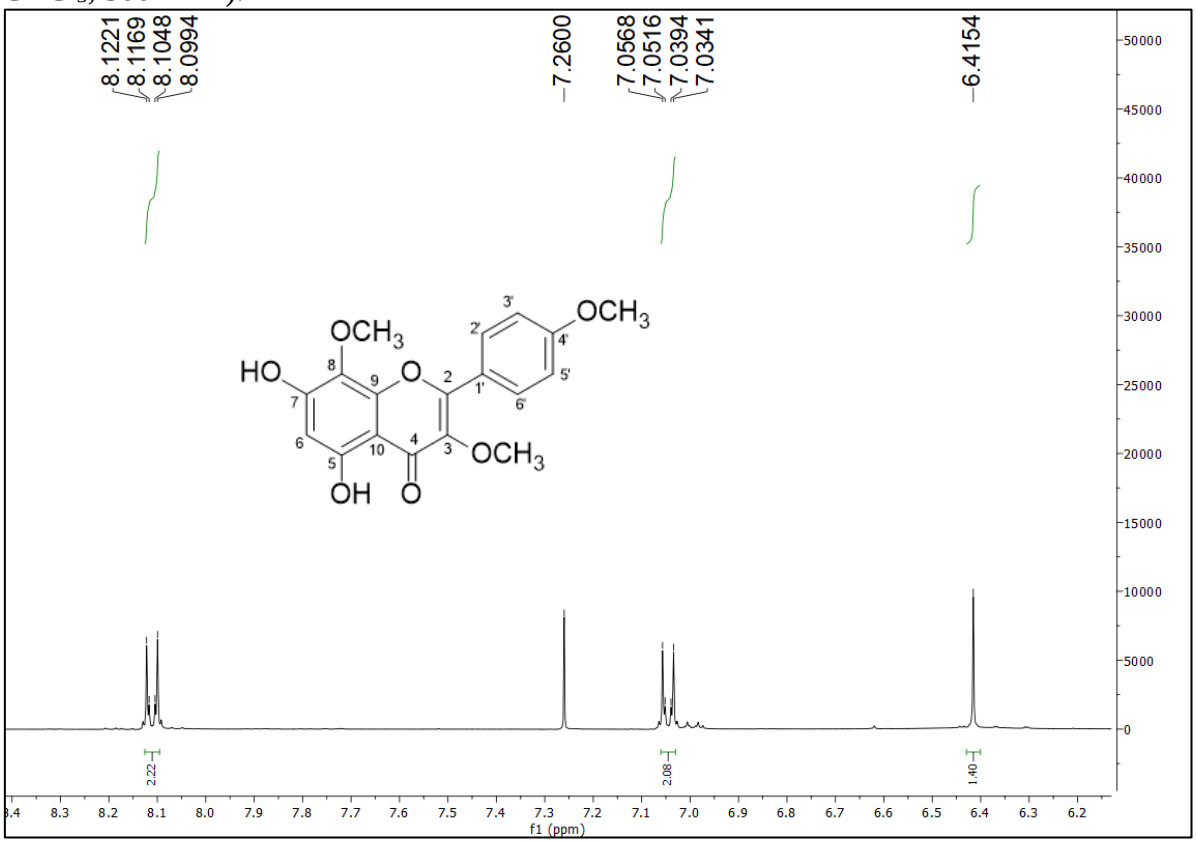



**Figura 81.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-6 na região entre 3,8 e 3,9 ppm (δ, $CDCl_3$, 500 MHz).

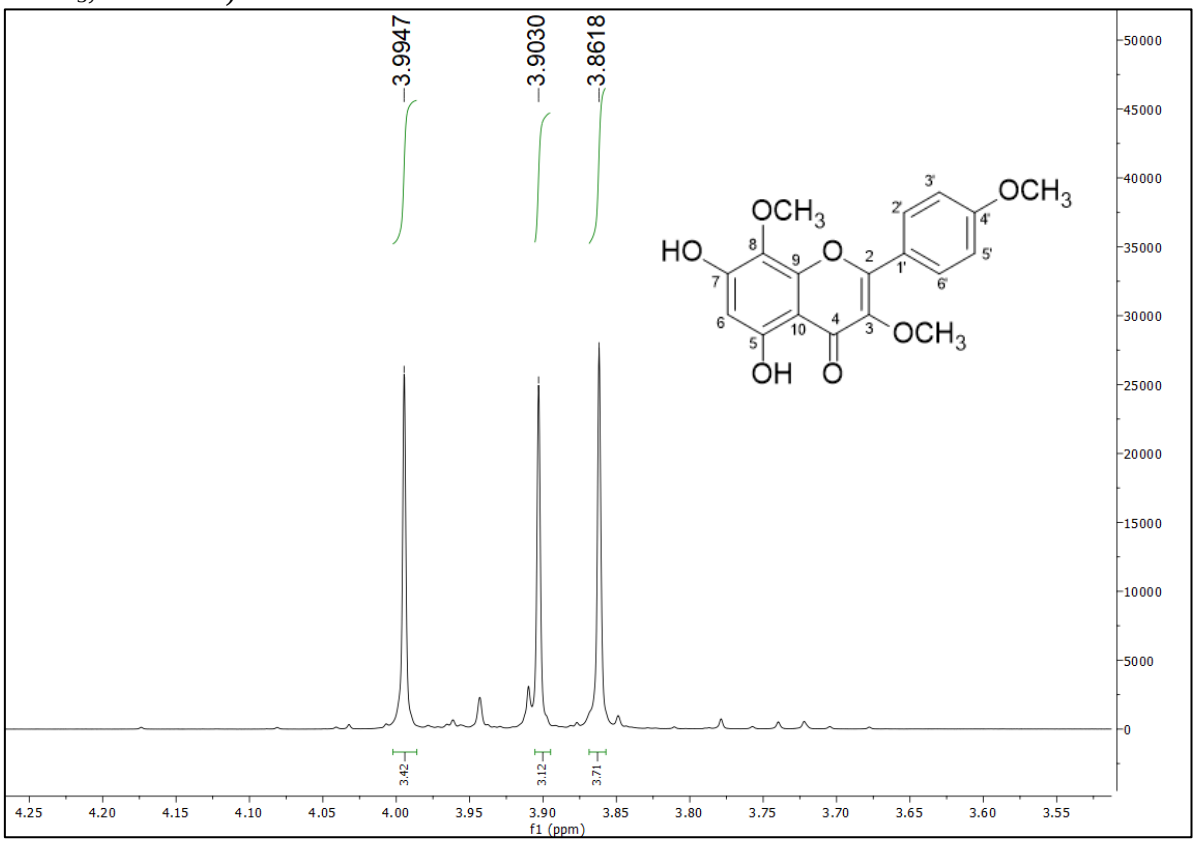
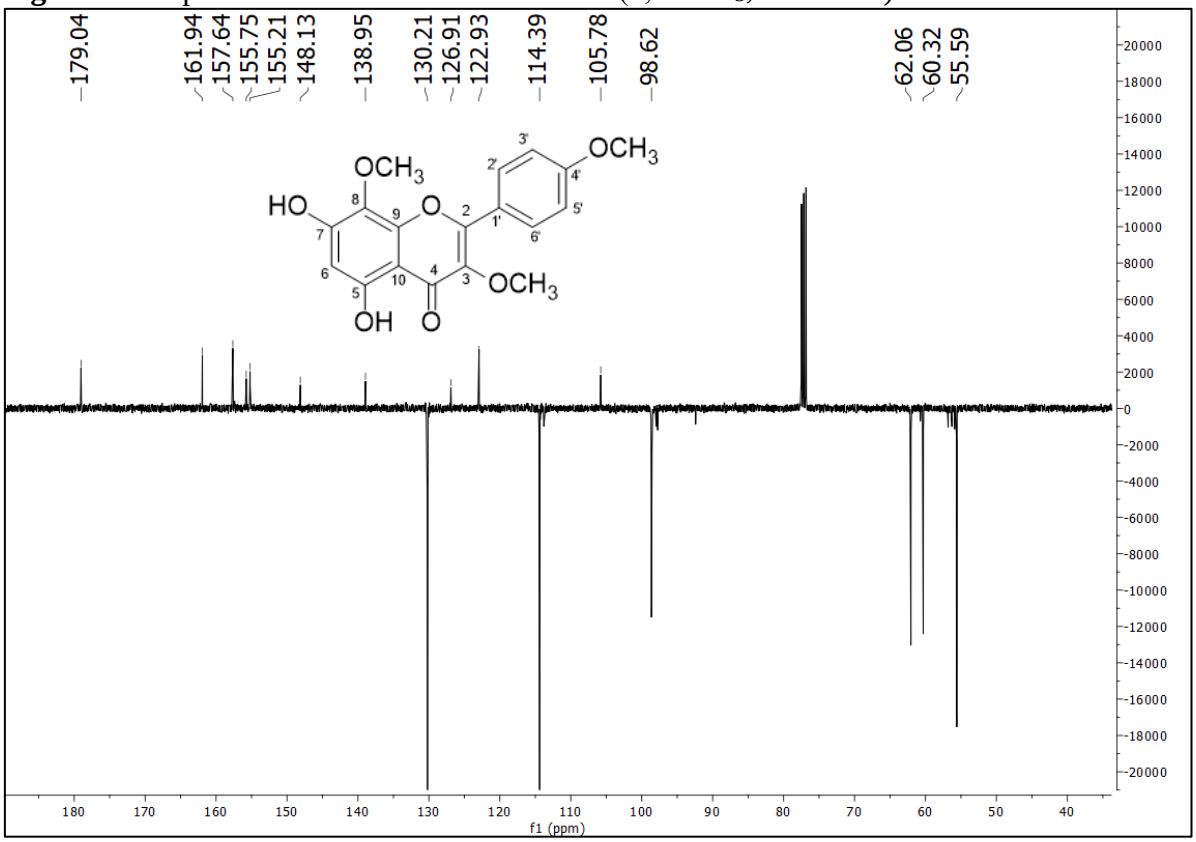


**Figura 82.** Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-6 (δ, $CDCl_3$, 125 MHz).




### 5.4.7 Determinação estrutural de *Pc*-7

A substância codificada como *Pc*-7 apresentou-se como um pó amarelado. Seu espectro de RMN $^1$H foi obtido a 500 MHz em DMSO-$d_6$ (Figura 84, pág. 152).

O espectro de RMN $^1$H e suas expansões mostraram sinais referentes a dois duplos dupletos em $\delta_H$ 7,96 ($J$ =9,0 Hz) e $\delta_H$ 6,97 ($J$ =8,9 Hz), integrando para dois hidrogênios cada, atribuídos aos conjuntos de hidrogênios H-2'/H-6' e H-3'/H-5', respectivamente (Figura 85, pág. 152) demonstrando assim a presença de um sistema AA'BB', assim como sugerido para as moléculas codificadas como *Pc*-5 e *Pc*-6 um esqueleto do tipo flavonoídico com anel B *para* substituído (CHAVES et al., 2017).

A análise do espectro de RMN de $^1$H de *Pc*-7 evidenciou um padrão compatível com um anel A pentassubstituído, também semelhante às substâncias *Pc*-5 e *Pc*-6, uma vez que não foram observados sinais em forma de dupletos atribuíveis aos hidrogênios desse anel. Observou-se apenas um sinal simpleto em $\delta_H$ 6,58 ppm, atribuído ao hidrogênio H-6 do anel A (Figura 85, pág. 152).

Ademais, a ausência de um segundo simpleto em torno de $\delta_H$ 6,80 ppm, normalmente atribuído ao hidrogênio na posição C-3 do anel C de flavonas, indicou que

essa posição encontra-se substituída, conforme descrito por Albuquerque et al., (2025).

Foram ainda observados três sinais intensos no espectro de RMN de $^{1}H$, característicos de hidrogênios metoxílicos, assim como em *Pc*-6, em $\delta_H$ 3,79, 3,80 e 3,90 ppm, todos integrando para três hidrogênios cada (Figura 86, pág. 153). Esses dados indicam a presença de três grupos metoxilas na estrutura da molécula, sugerindo que *Pc*-7 corresponderia a um flavonoide trimetoxilado, em consonância com dados reportados na literatura (SILVA et al., 2009).

A análise do espectro de RMN $^{13}C$ e de suas expansões, utilizando a técnica APT, revelou sinais correspondentes a dezoito átomos de carbono, compatíveis com o esqueleto de flavona. Destacam-se os sinais em $\delta_C$ 130,18 e $\delta_C$ 115,92, atribuídos aos conjuntos de carbonos C-2'/C-6' e C-3'/C-5', respectivamente, os quais corroboram a presença de um sistema aromático do tipo AA'BB' no anel B dos flavonoides (Figura 87, pág. 153), (FERREIRA et al., 2019).

Observou-se ainda um sinal em $\delta_C$ 178,80, característico do carbono da carbonila conjugada na posição C-4 do anel C dos flavonoides (Figura 87, pág. 153). A presença dos sinais em $\delta_C$ 56,67, $\delta_C$ 60,00 e $\delta_C$ 61,35 ppm confirmou a proposta inicial baseada no espectro de RMN de $^{1}H$, evidenciando a presença de três grupos metoxilas ligados ao núcleo flavonoídico (OLIVEIRA et al., 2025).

Já no espectro heteronuclear de HSQC (Figura 88, pág. 154) foi possível assinalar correlações entre os pares: H-6 ($\delta_H$ 6,58) com o C-6 ($\delta_C$ 95,80), H-2'/6' ($\delta_H$ 7,96) com C-2'/6' ($\delta_C$ 130,18), H-3'/5' ($\delta_H$ 6,97) com C-3'/5' ($\delta_C$ 115,92). Ainda foram vistas as ligações dos hidrogênios referentes aos grupos metoxilas em seus respectivos carbonos, sendo o H absorvendo em 3,79 ($\delta_C$ 60,00), 3,90 ($\delta_C$ 56,67), e 3,80 ($\delta_C$ 61,35).

A análise do espectro heteronuclear de HMBC (Figuras 89 e 90, págs. 154-155) permitiu identificar a localização das metoxilas pelas correlações a $^{3}J$ entre $\delta_H$ 3,80 e o carbono $\delta_C$ 128,44, confirmando uma metoxila no C-8, além de outra correlação a $^{3}J$ em $\delta_H$ 3,79 e 137,60 mostrando a presença de outra metoxila no C-3 do anel C, e por fim a presença evidenciada de outra correlação em $\delta_H$ 3,90 e $\delta_C$ 158,22 permitiu a localização da terceira metoxila no C-7 (Tabela 21, pág. 150).

Dessa forma, a análise integrada dos dados espectrais de RMN de $^{1}H$ e $^{13}C$ de *Pc*-7 (Tabela 20, pág. 149) corroboraram para a identificação do composto como sendo a 5,4'-dihidroxi-3,7,8-trimetoxiflavona (Figura 83, pág. 149). Flavonoide este isolado pela primeira vez na família Malvaceae.

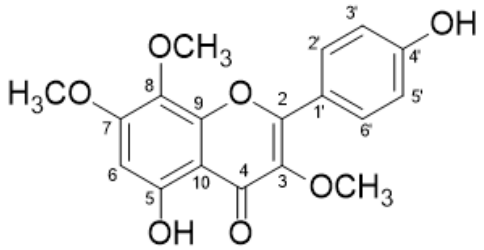



**Figura 83.** 3,7,8-trimetoxi-herbacetina

**Tabela 20.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-7** (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz) (SILVA et al., 2009).

| C | ***Pc*-6** | | ***Mo*-1** | | ***Pc*-7** | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** |
| **2** | - | 155,75 | - | 156,74 | - | 156,00 |
| **3** | - | 138,95 | - | 138,42 | - | 137,60 |
| **4** | - | 179,04 | - | 179,18 | - | 178,80 |
| **5** | 12,43 (s) | 155,21 | - | 157,24 | - | 156,44 |
| **6** | 6,42 (s) | 98,62 | 6,58 (s) | 96,59 | 6,58 (s) | 95,80 |
| **7** | - | 157,64 | - | 159,01 | - | 158,22 |
| **8** | - | 126,91 | - | 129,23 | - | 128,44 |
| **9** | - | 148,13 | - | 148,70 | - | 147,91 |
| **10** | - | 105,78 | - | 105,34 | - | 104,54 |
| **1’** | - | 122,93 | - | 121,51 | - | 120,60 |

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| **2'** | 8,11 (dd, *J* =8,7 e 2,6 Hz) | 130,21 | 7,97 (d, *J* =8,5 Hz, 2H) | 130,97 | 7,96 (d, *J* =9,0 Hz, 2H) | 130,18 |
| **3'** | 7,05 (dd, *J* = 8,7 e 2,6 Hz) | 114,39 | 6,98 (d, *J* =8,5 Hz, 2H) | 116,67 | 6,97 (d, *J* =8,9 Hz, 2H) | 115,92 |
| **4'** | - | 161,94 | - | 161,27 | - | 160,56 |
| **5'** | 7,05 (dd, *J* = 8,7 e 2,6 Hz) | 114,39 | 6,97 (d, *J* =8,5 Hz, 2H) | 116,67 | 6,97 (d, *J* =8,9 Hz, 2H) | 115,92 |
| **6'** | 8,11 (dd, *J* =8,7 e 2,6 Hz) | 130,21 | 7,97 (d, *J* =8,5 Hz, 2H) | 130,97 | 7,96 (d, *J* =9,0 Hz, 2H) | 130,18 |
| **3-OCH$_3$** | 3,86 (s) | 60,32 | 3,80 (s) | 60,56 | 3,79 (s) | 60,00 |
| **7-OCH$_3$** | - | - | 3,91 (s) | 57,38 | 3,90 (s) | 56,67 |
| **8-OCH$_3$** | 3,99 (s) | 62,06 | 3,81(s) | 61,91 | 3,80 (s) | 61,35 |
| **4'-OCH$_3$** | 3,90 (s) | 55,60 | | | | |

**Tabela 21.** Dados espectrais de HSQC e HMBC de ***Pc*-7** (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).

| **C** | **HSQC** | | **HMBC** | |
|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$^2$J** | **$^3$J** |
| **2** | - | 156,00 | - | - |
| **3** | - | 137,60 | - | - |
| **4** | - | 178,80 | - | - |
| **5** | - | 156,44 | - | - |
| **6** | 6,58 (s) | 95,80 | C-5; C-7 | C-8; C-10 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| **7** | - | 158,22 | - | - |
| **8** | - | 128,44 | - | - |
| **9** | - | 147,91 | - | - |
| **10** | - | 104,54 | - | - |
| **1'** | - | 120,60 | - | - |
| **2'** | 7,96 (d, *J* =9,0 Hz, 2H) | 130,18 | - | C-2; C-4' |
| **3'** | 6,97 (d, *J* =8,9 Hz, 2H) | 115,92 | C-4' | C-1' |
| **4'** | - | 160,56 | - | - |
| **5'** | 6,97 (d, *J* =8,9 Hz, 2H) | 115,92 | - | C-2; C-4' |
| **6'** | 7,96 (d, *J* =9,0 Hz, 2H) | 130,18 | C-4' | C-1' |
| **3-$OCH_3$** | 3,79 (s) | 60,00 | - | C-3 |
| **7-$OCH_3$** | 3,90 (s) | 56,67 | - | C-7 |
| **8-$OCH_3$** | 3,80 (s) | 61,35 | - | C-8 |

**Figura 84**. Espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-7 (δ, DMSO-$d_6$, 400 MHz).

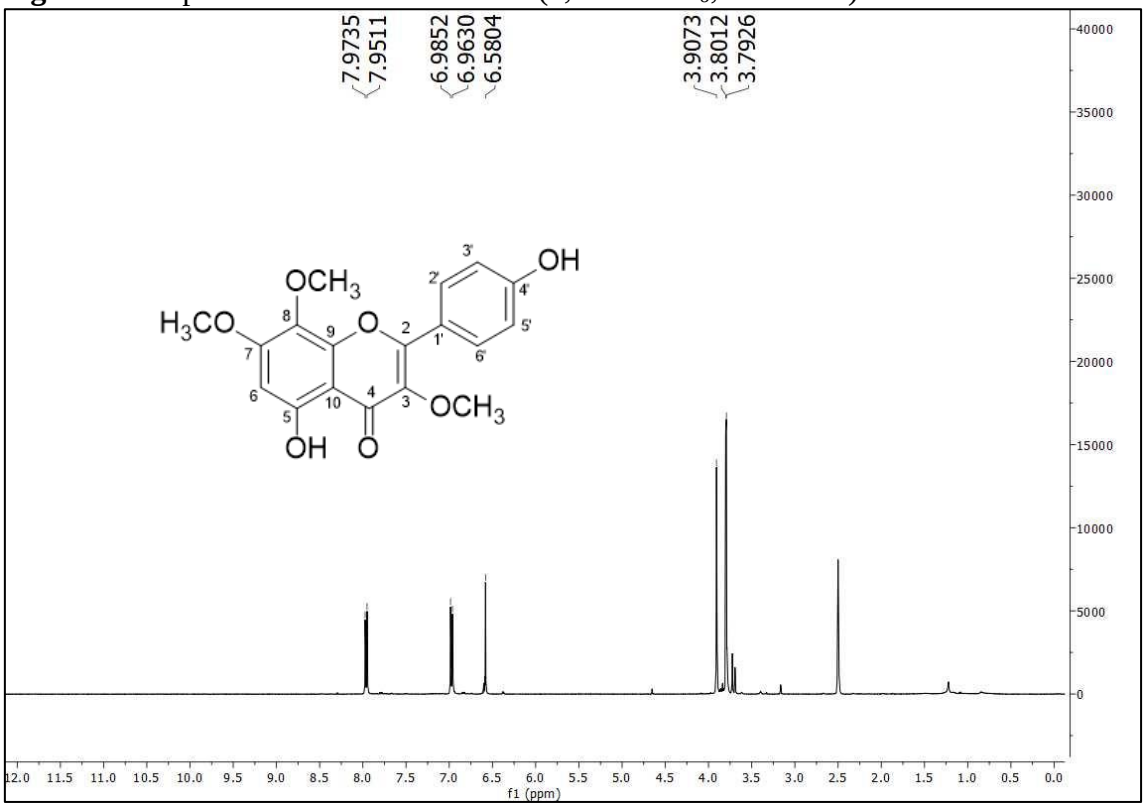



**Figura 85**. Expansão do espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-7 (δ, DMSO-$d_6$, 400 MHz).

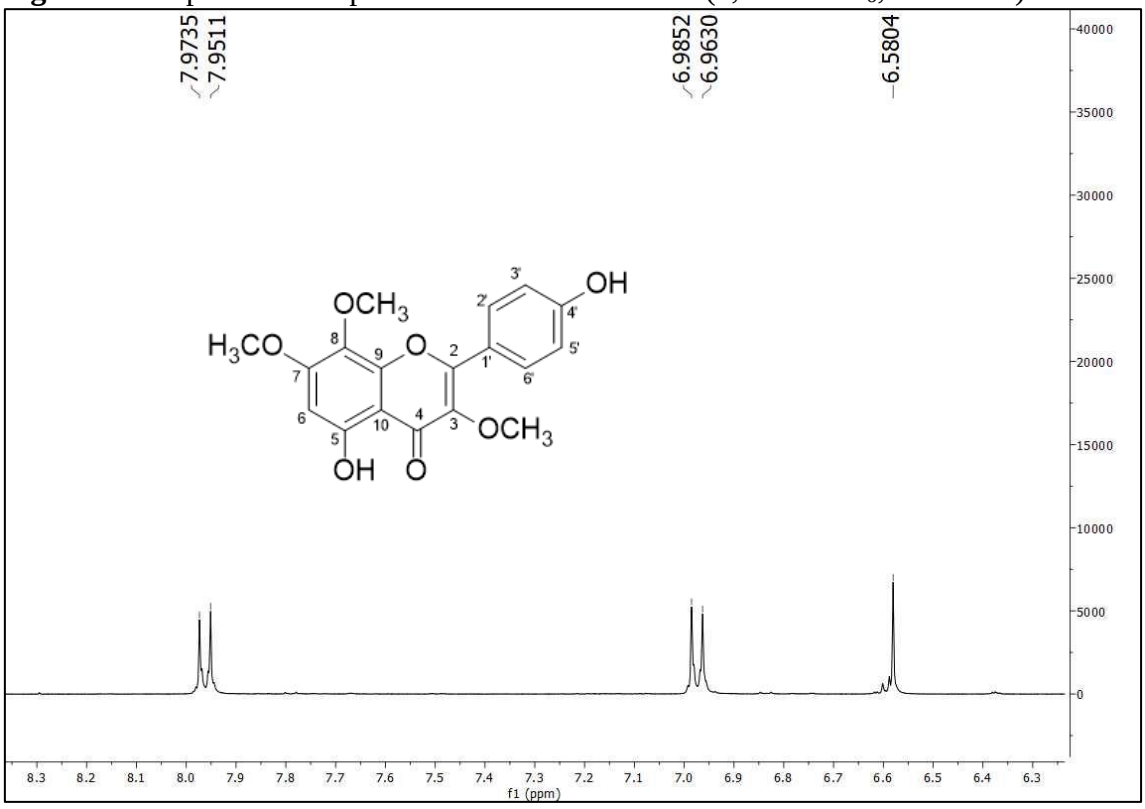


**Figura 86**. Expansão do espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-7 (δ, DMSO-$d_6$, 400 MHz).

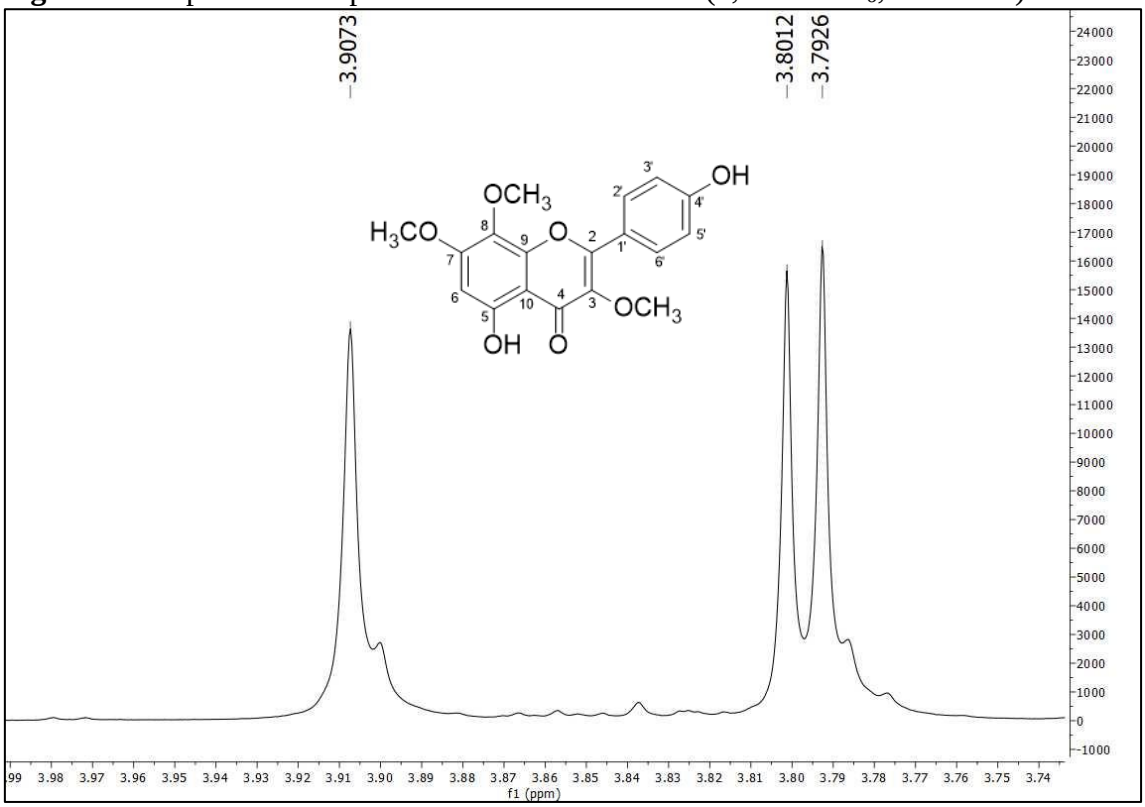



**Figura 87**. Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-7 (δ, DMSO-$d_6$, 100 MHz).

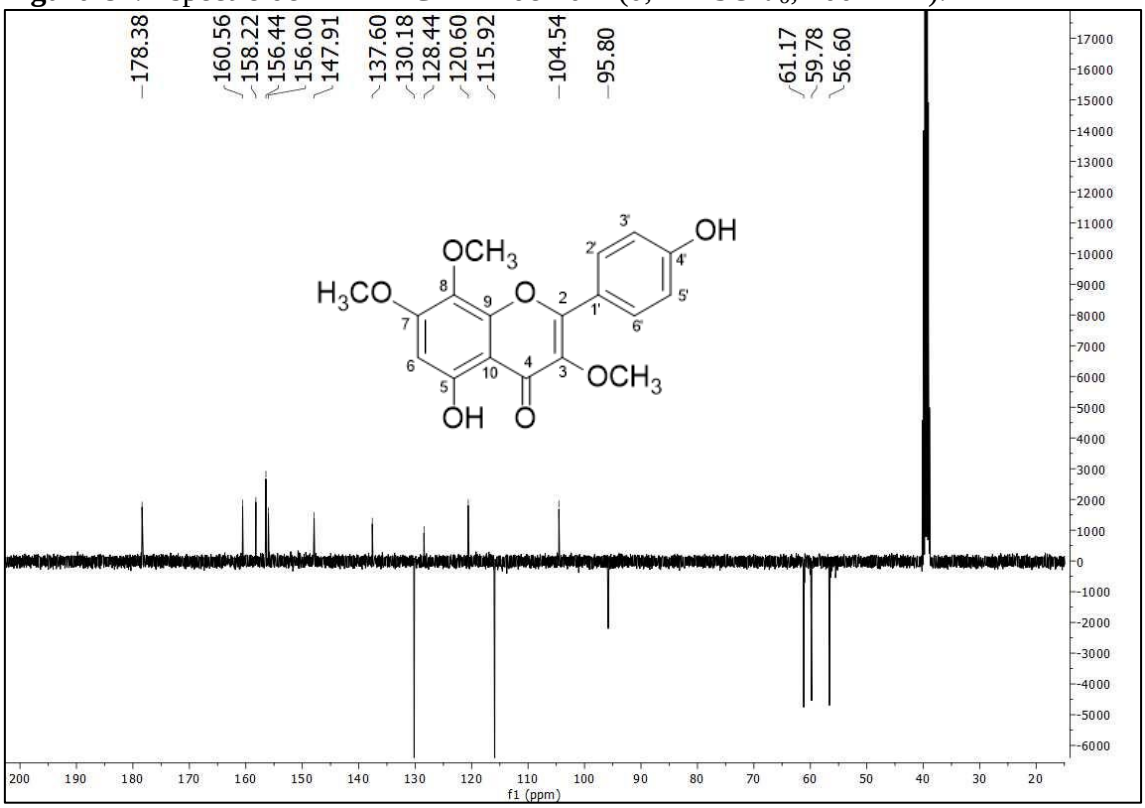


**Figura 88**. Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HSQC de *Pc*-7 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).

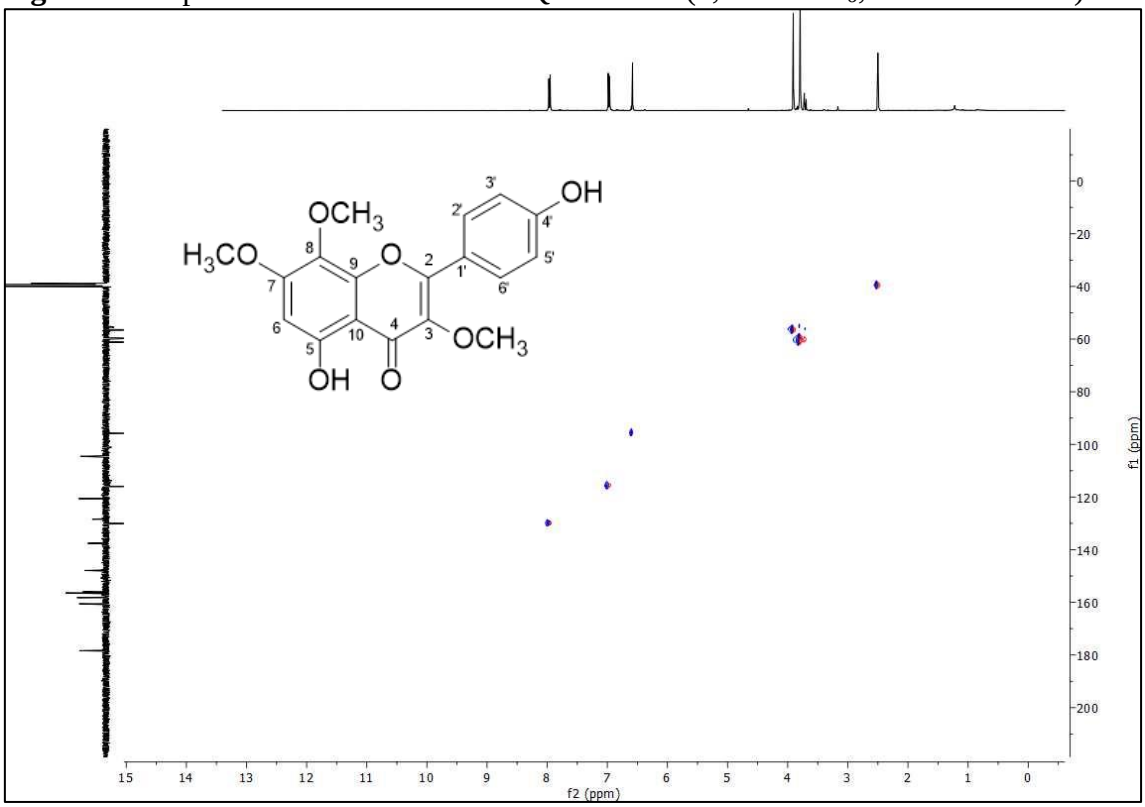



**Figura 89**. Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HMBC de *Pc*-7 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).

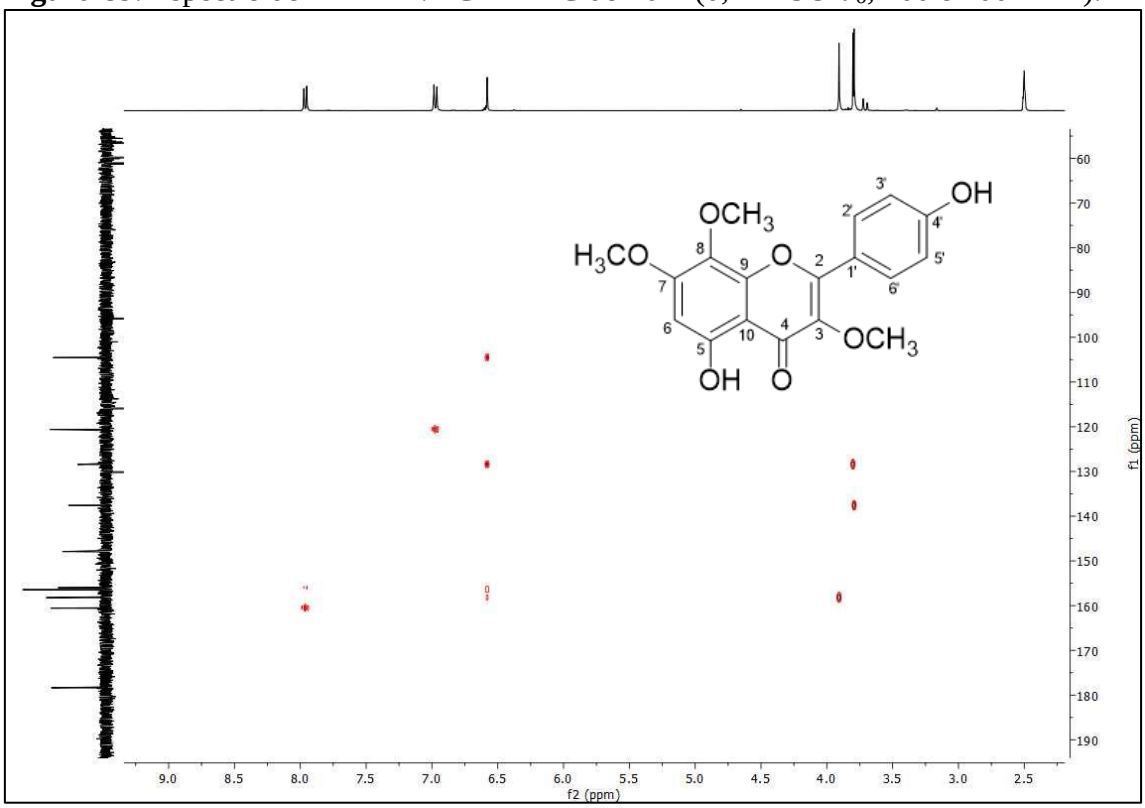


**Figura 90**. Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HMBC de *Pc*-7 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).




### 5.4.8 Determinação estrutural de *Pc*-8

A substância codificada como *Pc*-8 foi obtida na forma de um pó branco. A análise do espectro de RMN $^{1}H$ (Figura 94, pág. 157) revelou sinais típicos de cadeias alifáticas saturadas, destacando-se um sinal em forma de tripleto em $\delta_H$ 0,88, característico de hidrogênios metílicos terminais (-$CH_3$), bem como um conjunto de sinais localizados entre $\delta_H$ 1,55 e 1,25 ppm, atribuídos a hidrogênios metilênicos (-$CH_2$-) (PAVIA et al., 2015) (Figura 95, pág. 157).

O espectro de RMN $^{13}C$ e suas expansões (Figuras 96 e 97, pág. 158) corroboraram essa interpretação, evidenciando um sinal referente a carbono metílico em $\delta_C$ 14,26 e múltiplos sinais correspondentes a carbonos metilênicos compreendidos entre $\delta_C$ 22,85 e 32,09 ppm. Esse conjunto de dados espectroscópicos indicou que *Pc*-8 não correspondia a uma substância pura, mas sim a uma mistura de hidrocarbonetos alifáticos de cadeia longa (SOUSA, 2012).

Diante dessa evidência, a substância *Pc*-8 foi submetida à análise por cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (CG-EM), visando à identificação dos constituintes presentes na amostra. Para a análise comparativa dos

espectros de massas, foram utilizados os registros da biblioteca computacional NIST (62 NIST.Lib).

A partir da análise do cromatograma obtido (Figura 93, pág. 156), foi possível identificar dois constituintes majoritários na amostra. O primeiro apresentou tempo de retenção de 7,403 minutos, com fórmula molecular $C_{26}H_{54}$ (366,7070), correspondendo a 32,04% de abundância relativa. O segundo constituinte exibiu tempo de retenção de 8,275 minutos, com fórmula molecular $C_{40}H_{82}$ (563,0791), representando 46,87% da abundância total da amostra (Tabela 22, pág. 156), sendo este identificado como hexacosano e tetracontano, respectivamente (Figura 91 e 92, pág. 156).

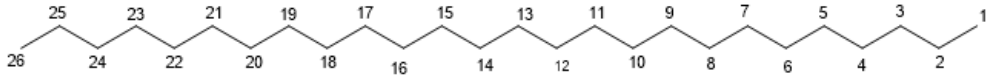



**Figura 91.** Hexacosano

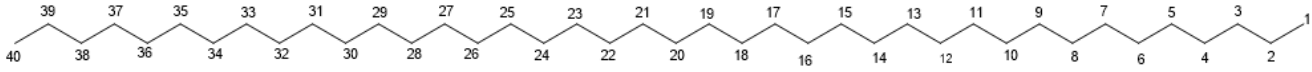



**Figura 92.** Tetracontano

**Tabela 22.** Dados obtidos pela análise de CG-EM.

| Nº | Área % | Composto | TR (Composto) | Fórmula Molecular | Peso Molecular |
|---|---|---|---|---|---|
| **1** | 32.04 | Hexacosano | 7.403 | $C_{26}H_{54}$ | 366.7070 |
| **2** | 46.87 | Tetracontano | 8.275 | $C_{40}H_{82}$ | 563.0791 |

**Figura 93**. Cromatograma da mistura de hidrocarbonetos.

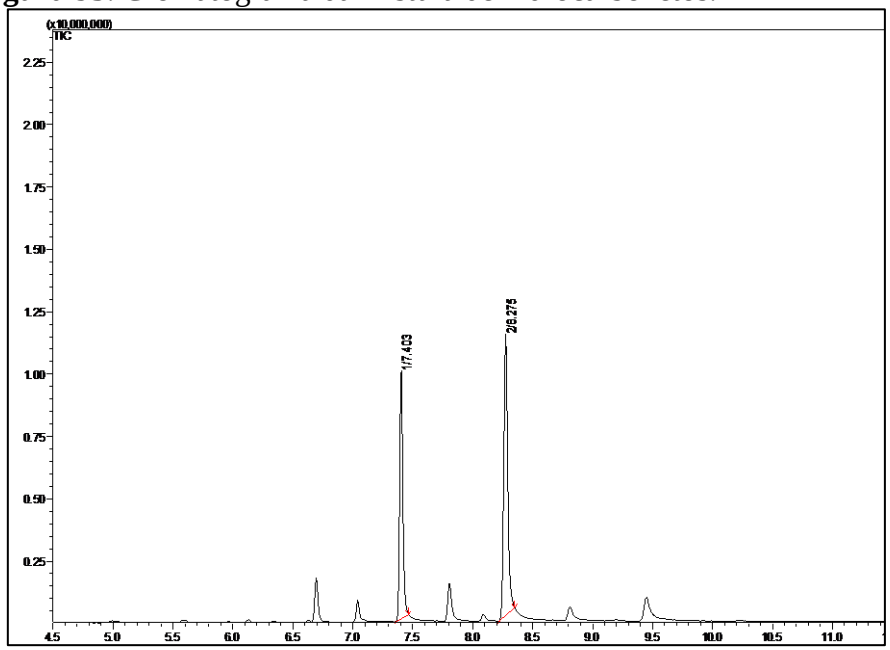


**Figura 94.** Espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-8 (δ, $CDCl_3$, 500 MHz).

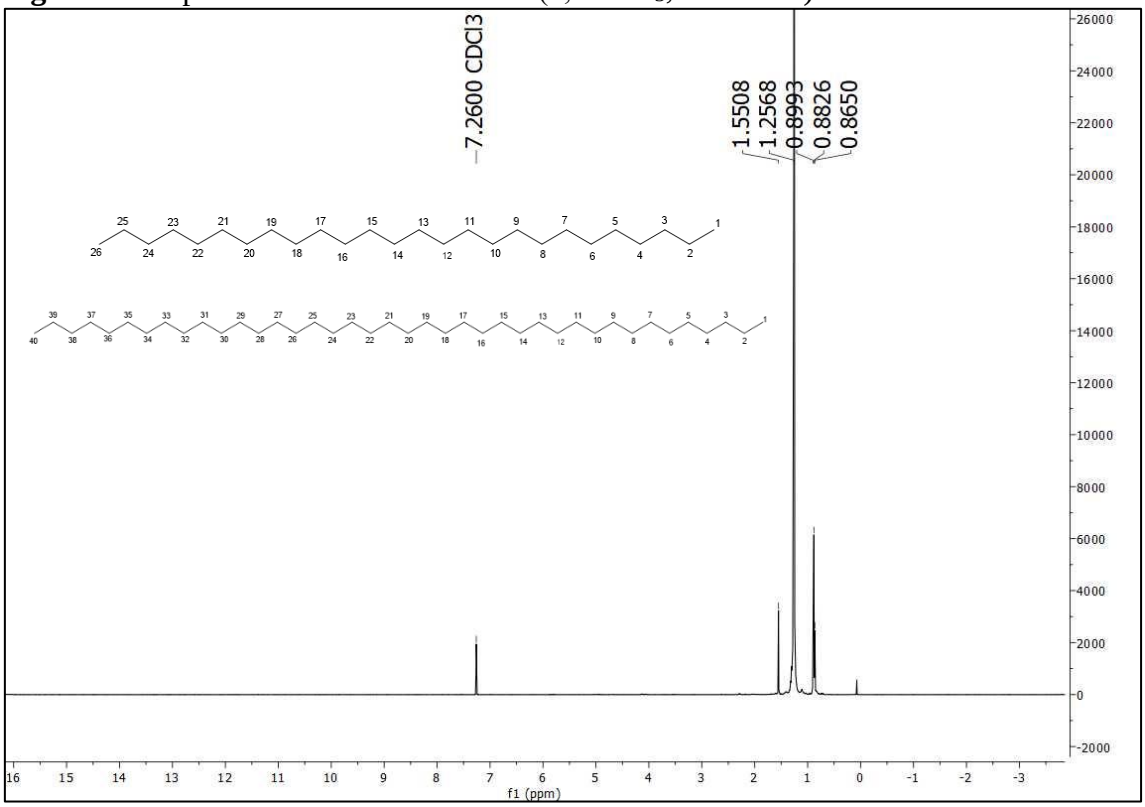



**Figura 95.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-8 (δ, $CDCl_3$, 500 MHz).

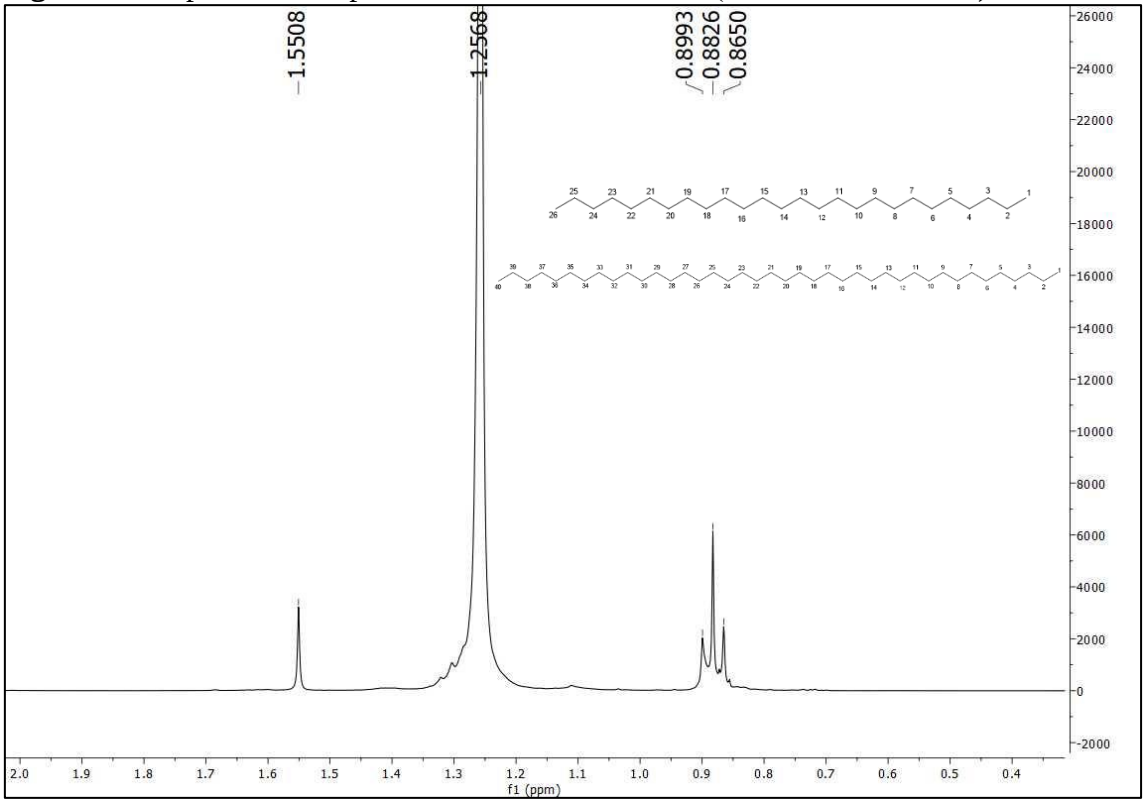


**Figura 96.** Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-8 (δ, $CDCl_3$, 125 MHz).

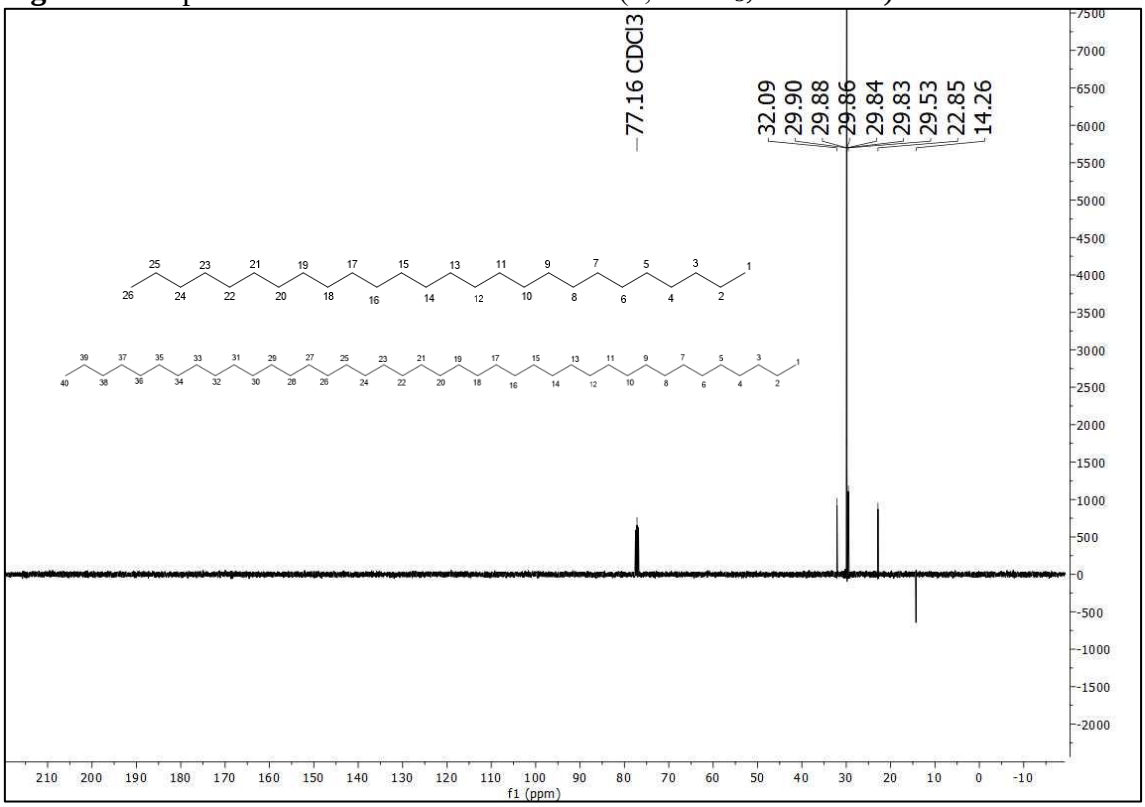
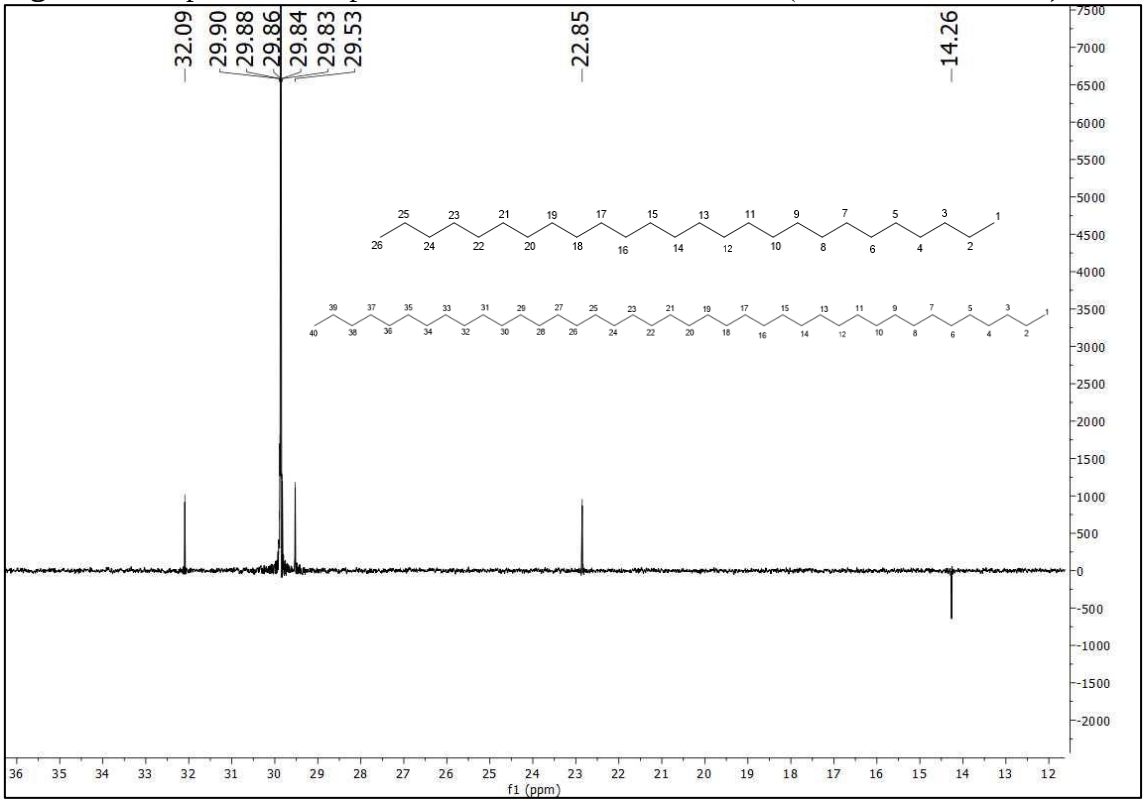



**Figura 97.** Expansão do espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-8 (δ, $CDCl_3$, 125 MHz).



### 5.4.9 Determinação estrutural de *Pc*-9

A substância *Pc*-9 foi obtida na forma de um sólido branco, de aspecto ceroso. A análise do espectro de RMN de $^{1}H$ (Figura 99, pág. 161) revelou sinais atribuídos exclusivamente a hidrogênios ligados a carbonos $sp^3$, compatíveis com uma estrutura alifática saturada. Observou-se um sinal em $\delta_H$ 2,35, apresentando-se como um tripleto com constante de acoplamento ($J$ =7,5 Hz), característico de hidrogênios metilênicos ($CH_2$) em posição α em relação ao grupo ácido carboxílico. A presença de um grupo metila terminal na cadeia foi inferida a partir do tripleto observado em $\delta_H$ 0,88 (FERNANDES et al., 2018) (Figura 100, pág. 161).

Adicionalmente, os sinais distribuídos entre $\delta_H$ 1,63 e 1,26 ppm são atribuídos a hidrogênios metilênicos repetitivos ao longo de uma cadeia alifática longa. A integração dos sinais compreendidos entre $\delta_H$ 2,34 e 0,87 ppm (Figura 100, pág. 161), correspondente a um total de 31 hidrogênios (Tabela 23, pág. 160), forneceu subsídios para propor que a substância *Pc*-9 corresponderia ao ácido palmítico, em concordância com dados previamente descritos na literatura (BULAMA et al., 2014).

A elucidação estrutural foi reforçada pela análise do espectro de RMN $^{13}C$ e de suas expansões (Figuras 101 e 102, pág. 162), no qual se observaram sinais compatíveis com um ácido graxo saturado de cadeia longa. Destaca-se a presença de um sinal em $\delta_C$ 179,01, atribuído ao carbono da carbonila do grupo ácido carboxílico, bem como de um sinal em $\delta_C$ 14,26, referente ao carbono da metila terminal. Foram ainda observados quatorze sinais correspondentes a carbonos metilênicos ($\delta_C$ 34,01; 32,09; 29,86; 29,75; 29,59; 29,52; 29,40; 29,23; 24,86 e 22,85 ppm (Tabela 23, pág. 160), em conformidade com dados reportados por Brito-Filho et al. (2017).

Dessa forma, a análise conjunta dos espectros unidimensionais de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$, aliada à comparação com valores de deslocamentos químicos descritos na literatura (Tabela 23, pág. 160), permitiu identificar a substância *Pc*-9 como o ácido palmítico (Figura 98, pág. 160). Esse composto já havia sido previamente isolado de *Pilosocereus pachycladus* (BRITO-FILHO et al., 2017), *Hibiscus sabdariffa* (AJOKU et al., 2015) e *Helicteres velutina* (FERNANDES et al., 2020), sendo aqui relatado, pela primeira vez, na espécie *P. cancellata*.

No que se refere à relevância biológica, as espécies vegetais ricas em ácidos graxos têm apresentado atividade larvicida promissora, como em estudos que demonstraram que o ácido palmítico pode atuar como ligante em proteínas do mosquito

*Aedes aegypti* (SINGARAPU et al., 2010; MA et al., 2015). E, em alguns estudos, demonstrou-se que o ácido palmítico, presente em extratos naturais de plantas, contribui para a atividade larvicida contra larvas de *Aedes aegypti*, possivelmente por ação sobre enzimas como acetilcolinesterase, evidenciada em extratos de *Millettia pinnata* (PERUMALSAMY et al., 2015).

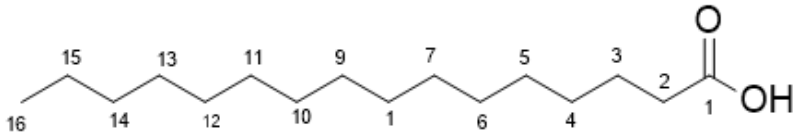



**Figura 98.** Ácido Palmítico.

**Tabela 23.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-9** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) (FERNANDES et al., 2018).

| | ***Pc*-9** | | ***Mo*-1** | |
|---|---|---|---|---|
| C | $\delta_H$ | $\delta_C$ | $\delta_H$ | $\delta_C$ |
| 1 | - | 179,01 | - | 178,60 |
| 2 | 2,35 (t, J= 7,5 Hz, 2H) | 34,01 | 2,34 (t, J= 7,4 Hz, 2H) | 33,90 |
| 3 | - | 24,86 | - | 24,80 |
| 4 | - | 32,09 | - | 32,00 |
| 5 | - | 29,86 | - | 29,80 |
| 6 | - | 29,75 | - | 29,70 |
| 7 | 1,26 (sl, 24H) | 29,59 | 1,25 (sl, 24H) | 29,50 |
| 8 | - | 29,40 | - | 29,40 |
| 9 | - | 29,23 | - | 29,20 |
| 10 | - | 29,23 | - | 29,20 |
| 11 | - | 29,52 | - | 29,50 |
| 12 | - | 29,86 | - | 29,80 |
| 13 | - | 29,86 | - | 29,80 |
| 14 | - | 29,86 | - | 29,80 |
| 15 | 1,63 (p, J= 7,3 Hz, 2H) | 22,85 | 1,63 (q, 2H) | 22,80 |
| 16 | 0,88 (t, J= 6,7 Hz, 3H) | 14,26 | 0,87 (t, J= 6,6 Hz, 3H) | 14,20 |

**Figura 99.** Espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-9 ($\delta$, $CDCl_3$, 400 MHz).

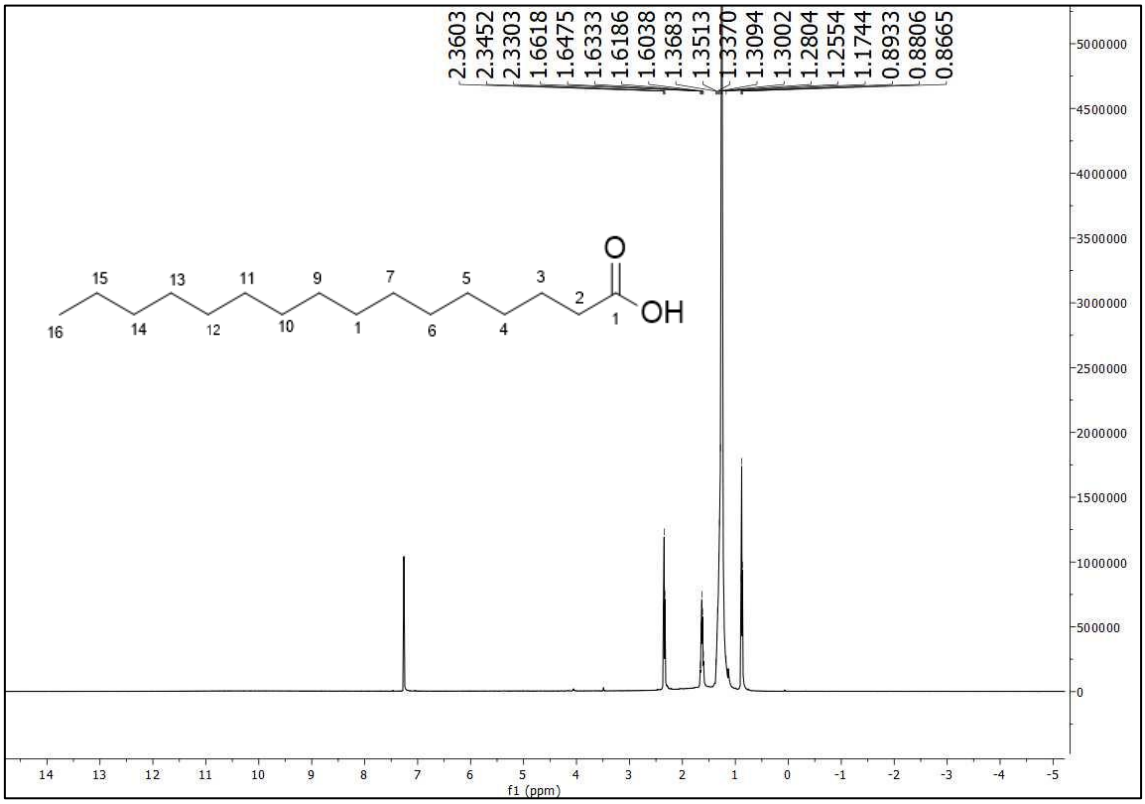



**Figura 100.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-9 ($\delta$, $CDCl_3$, 400 MHz).

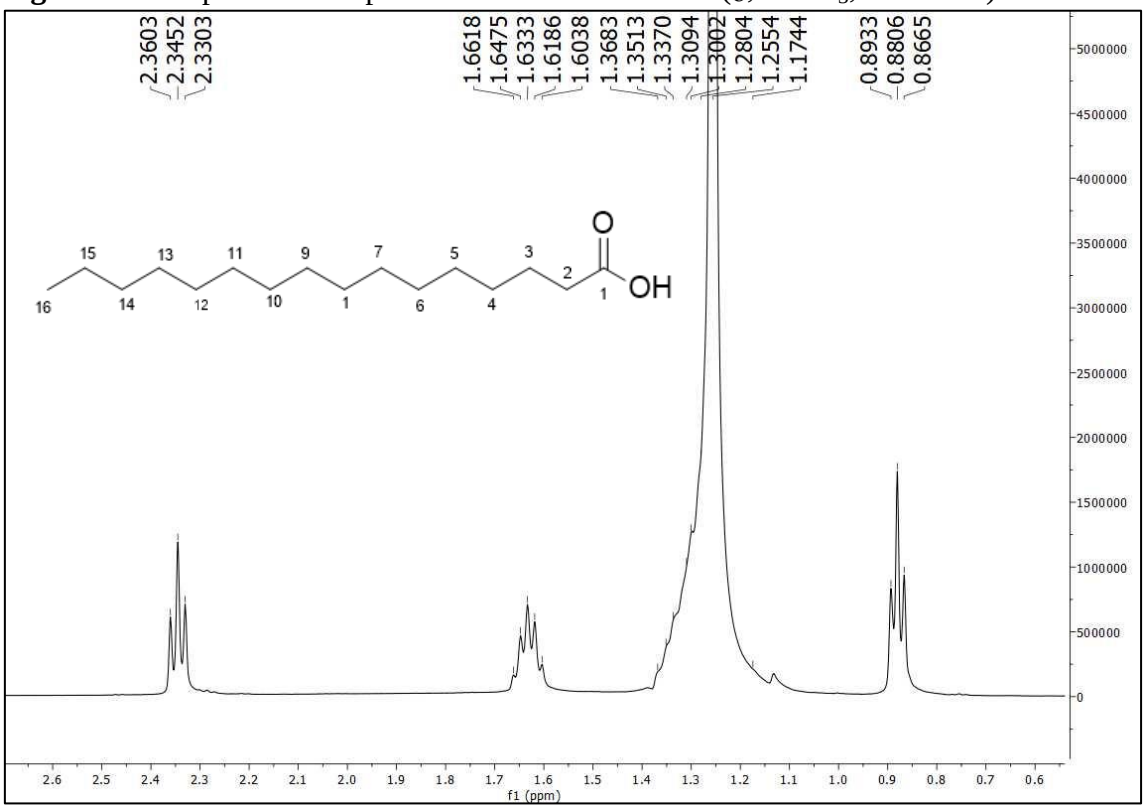


**Figura 101.** Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-9 (δ, $CDCl_3$, 100 MHz).

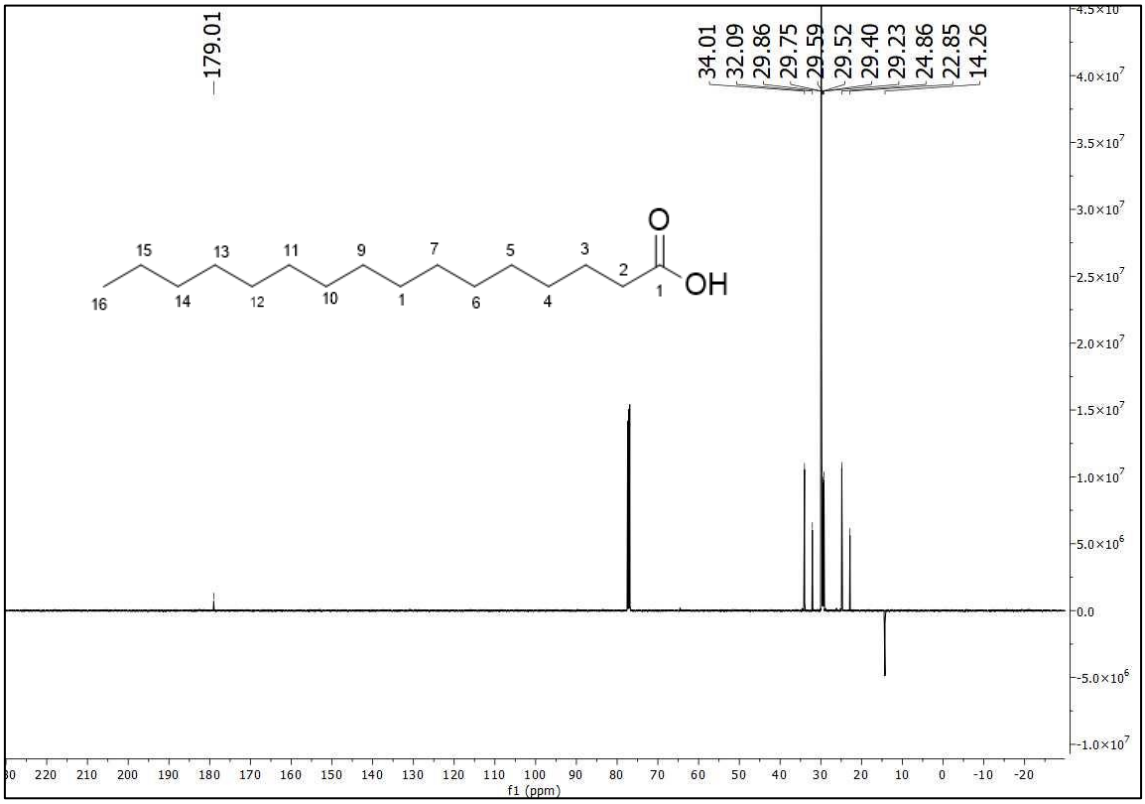
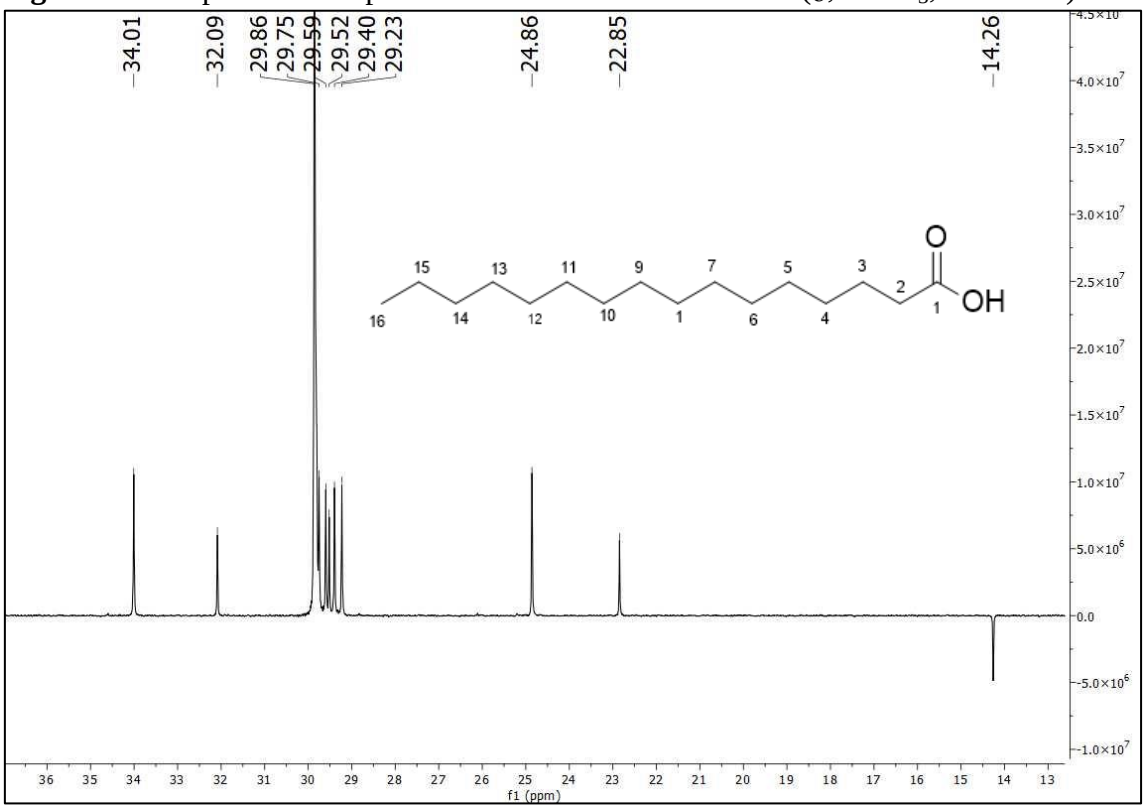



**Figura 102.** Expansão do espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-9 (δ, $CDCl_3$, 100 MHz).



### 5.4.10 Determinação estrutural de *Pc*-10

A substância codificada como *Pc*-10 apresentou-se sob a forma de um pó branco. Ao analisar seu espectro de RMN de $^{1}H$, obtido a 400 MHz em $CDCl_3$ (Figura 105, pág. 168), foi possível observar sinais duplicados característicos de um esqueleto triterpênico do tipo cicloartano, sugerindo a presença de uma mistura de dois compostos, codificados como *Pc*-10a e *Pc*-10b.

A análise das expansões do espectro de RMN $^{1}H$ evidenciou dois dupletos fortemente blindados em $\delta_H$ 0,33 ($J$ =4,2 Hz) e $\delta_H$ 0,55 ($J$ =4,1 Hz), atribuídos aos prótons H-19, característicos do anel ciclopropano fundido ao núcleo cicloartano (Figura 107, pág. 169) confirmando a presença de triterpenos desta classe estrutural (GOMES et al., 2005). A existência de uma dupla ligação terminal na cadeia lateral foi confirmada pela presença de sinais correspondentes a hidrogênios vinílicos em $\delta_H$ 4,93 (J= 3,4; 1,8; 0,9 Hz) e $\delta_H$ 4,83 (J= 1,6 Hz), atribuídos aos prótons do grupo ($=CH_2$) na posição C-26 (PEI et al., 2007) (Figura 106, pág. 168).

O espectro de RMN $^{1}H$ revelou ainda seis sinais de hidrogênios metílicos, observados em $\delta_H$ 0,96 (s), 0,88 (s), 1,72 (s), 0,89 (s), 0,96 (s) e 0,81 (s), atribuídos às metilas H-18, H-21, H-27, H-28, H-29 e H-30, respectivamente, padrão compatível com o núcleo triterpênico cicloartano (Figura 107, pág. 169). Um duplo-dupleto em $\delta_H$ 3,28 (J= 11,2; 4,4 Hz), foi atribuído ao hidrogênio oximetínico H-3, indicando a presença de uma hidroxila em configuração $\beta$ na posição C-3, comum a ambas as moléculas (AYATOLLAHI et al., 2011) (Figura 106, pág. 168).

A presença de uma segunda hidroxila na cadeia lateral foi inferida a partir de sinais adicionais de hidrogênios oximetínicos em $\delta_H$ 4,02 (J= 6,3 Hz,), associados à posição C-24 (Figura 106, pág. 168), cuja duplicação dos sinais no espectro de RMN $^{1}H$ corroborou a existência de uma mistura epimérica em C-24, característica dos compostos 24(*R*) e 24(*S*) (LIN et al., 2023).

A análise do espectro de RMN $^{13}C$, obtido a 100 MHz com experimento APT (Figura 108, pág. 169), revelou a presença de 30 sinais de carbono, compreendendo seis carbonos metílicos ($CH_3$), doze metilênicos ($CH_2$), sete metínicos (CH) e cinco carbonos quaternários (C), confirmando a natureza triterpênica da amostra (Figura 110, pág. 170).

Destaca-se a presença de um sinal em $\delta_C$ 30,03 ppm, atribuído ao carbono do anel ciclopropano (C-19), juntamente com sinais em $\delta_C$ 76,91, $\delta_C$ 147,93 ppm e $\delta_C$ 111,53 ppm para *Pc*-10a e sinais em $\delta_C$ 76,51, $\delta_C$ 147,64 ppm e $\delta_C$ 111,03 ppm para *Pc*-10b,

correspondentes aos carbonos C-24, C-25, e C-26, respectivamente, característicos de uma dupla ligação terminal na cadeia lateral. O carbono oximetínico C-3 foi observado em $\delta_C$ 79,00 ppm para ambas as moléculas (PEI et al., 2007) (Figura 109, pág. 170).

No espectro de HSQC, observam-se correlações diretas entre prótons e carbonos ligados, o que permite a atribuição dos sinais de carbonos metínicos, metilênicos e metílicos do núcleo triterpênico. Destacam-se as correlações dos prótons com carbonos oxigenados, em especial as atribuídas ao C-3 e ao C-24, compatíveis com a presença dos grupos hidroxila em posição 3*β* e 24. Os sinais referentes à dupla ligação em C-25 também apresentam correlações típicas entre prótons olefínicos e seus respectivos carbonos, o que confirma a insaturação na cadeia terminal. Deslocamentos químicos observados em alguns sinais do HSQC refletem a presença dos dois epímeros (24*R* e 24*S*) na mistura (LIN et al., 2023) (Figura 111, pág. 171).

No espectro de HMBC foram vistas correlações entre o próton de C-24 em $\delta_H$ 4,02 (J= 6,3 Hz) à três ligações dos carbonos vizinhos C-22, C-26 e C-27 e a 2 ligações com o C-25. O próton oximetínico em $\delta_H$ 3,28 (J= 11,2; 4,4 Hz), referente ao C-3 a 3 ligações com os carbonos C-1, C-29 e C-30 e a 2 ligações com o C-2, corroborando a posição do grupo hidroxila (AYATOLLAHI et al., 2011) (Figuras 112 e 113, págs. 171-172).

Adicionalmente, as correlações de longa distância envolvendo os prótons olefínicos e os carbonos da cadeia lateral confirmam a localização da dupla ligação em C-25. Assim como no HSQC, o HMBC apresenta sinais duplicados ou levemente deslocados para alguns carbonos da região do C-24, consistentes com a mistura de epímeros, conforme mostra a Tabela 25 (pág. 166).

O conjunto dos dados de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ juntamente com os dados bidimensionais de HSQC e HMBC (Tabelas 24 e 25, págs. 165-166) foram compatíveis com a estrutura proposta dos cicloartanos 24(*R*)- cicloart-25-en-3*β*,24-diol (Figura 103, pág. 164) e 24(*S*)-cicloart-25-en-3*β*,24-diol (Figura 104, pág. 164) para *Pc*-10, permitindo a atribuição dos principais sinais de RMN e confirmando a presença da mistura epimérica, substâncias estas isoladas pela primeira vez na espécie em estudo.

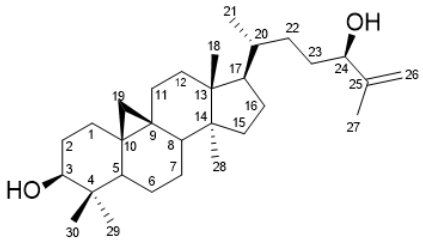



**Figura 103.** 24(*R*)-cicloart-25-en-3β,24-diol

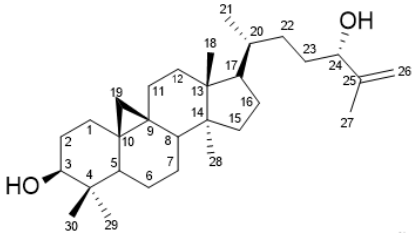



**Figura 104.** 24(*S*)-cicloart-25-en-3β,24-diol

**Tabela 24.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-10** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) com modelos da literatura ***Mo*-1** e ***Mo*-2** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) (PEI et al., 2007).

| C | ***Pc*-10a** | | ***Pc*-10b** | | ***Mo*-1** **24(*S*)-cicloart-25-en-3*β*,24-diol** | | ***Mo*-2** **Ácido 24(*R*)-3,4-seco-cicloart-4(29),25-dien-24-hidroxi-3-oico** | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** |
| **1** | - | 32,12 | - | 32,12 | - | 31,90 | - | 28,80 |
| **2** | - | 30,54 | - | 30,54 | - | 30,30 | - | 31,40 |
| **3** | 3,28 (dd, J= 11,2; 4,4 Hz, 1H) | 79,00 | 3,28 (dd, J= 11,2; 4,4 Hz, 1H) | 79,00 | 3,27 (m, 1H) | 78,80 | - | 179,50 |
| **4** | - | 40,64 | - | 40,64 | - | 40,40 | - | 149,40 |
| **5** | - | 47,27 | - | 47,27 | - | 47,00 | - | 45,90 |
| **6** | - | 21,27 | - | 21,27 | - | 21,10 | - | 27,80 |
| **7** | - | 26,63 | - | 26,63 | - | 26,00 | - | 25,00 |
| **8** | - | 48,13 | - | 48,13 | - | 47,90 | - | 47,70 |
| **9** | - | 20,15 | - | 20,15 | - | 19,90 | - | 21,40 |
| **10** | - | 26,25 | - | 26,25 | - | 26,00 | - | 27,00 |
| **11** | - | 26,16 | - | 26,16 | - | 26,40 | - | 27,00 |
| **12** | - | 33,05 | - | 33,05 | - | 32,80 | - | 33,00 |
| **13** | - | 45,45 | - | 45,45 | - | 45,20 | - | 45,10 |
| **14** | - | 48,97 | - | 48,97 | - | 48,70 | - | 48,90 |
| **15** | - | 35,71 | - | 35,71 | - | 35,50 | | 35,60 |
| **16** | - | 28,29 | - | 28,23 | - | 28,10 | - | 28,10 |
| **17** | - | 52,33 | - | 52,33 | - | 52,10 | - | 52,10 |
| **18** | 0,96 (s, 6H) | 18,18 | 0,96 (s, 6H) | 18,18 | 0,95 (s, 6H) | 18,00 | 0,94 (s, 3H) | 18,00 |
| **19** | 0,55 (d, J= 4,1 Hz); 0,33 (d, J= 4,2 Hz) | 30,03 | 0,55 (d, J= 4,1 Hz); 0,33 (d, J= 4,2 Hz) | 30,03 | 0,53; 0,31 (d, J= 4,2 Hz, 1H) | 29,80 | 0,71;0,39 (d, J= 4,0 Hz, 1H) | 29,90 |
| **20** | - | 36,10 | - | 36,07 | - | 35,90 | - | 36,00 |
| **21** | 0,88 (s, 3H) | 18,48 | 0,88 (s, 3H) | 18,46 | 0,87 (d, J= 6,3 | 18,30 | 0,87 (d, J= 6,0 Hz, 3H) | 18,30 |

| | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | | Hz, 3H) | | | |
| **22** | - | 32,06 | - | 31,83 | - | 31,90 | - | 31,90 |
| **23** | - | 31,68 | - | 31,68 | - | 31,60 | - | 31,70 |
| **24** | 4,02 (t, J= 6,3 Hz, 1H) | 76,91 | 4,02 (t, J= 6,3 Hz, 1H) | 76,51 | 4,00 (dd, J= 12,5; 7,5 Hz, 1H) | 76,30 | 4,01 (t, J= 6,4 Hz, 1H) | 76,70 |
| **25** | - | 147,93 | - | 147,64 | - | 147,70 | - | 147,40 |
| **26** | 4,93 (ddd, J= 3,4; 1,8; 0,9 Hz), 1H<br>4,83 (q, J= 1,6 Hz, 1H) | 111,53 | 4,93 (ddd, J= 3,4; 1,8; 0,9 Hz), 1H<br>4,83 (q, J= 1,6 Hz, 1H) | 111,03 | 4,91;4,81 (1H, sl) | 110,80 | 4,91;4,81 (1H, sl) | 110,90 |
| **27** | 1,72 (s, 6H) | 17,75 | 1,72 (s, 6H) | 17,36 | 1,71 (s, 3H) | 17,60 | 1,70 (s, 3H) | 17,20 |
| **28** | 0,89 (s, 6H) | 19,47 | 0,89 (s, 6H) | 19,47 | 0,88 (s, 3H) | 19,30 | 0,91 (s, 3H) | 19,30 |
| **29** | 0,96 (s, 6H) | 14,15 | 0,96 (s, 6H) | 14,15 | 0,95 (s, 6H) | 14,00 | 4,80;4,71 (1H, sl) | 111,50 |
| **30** | 0,81 (s, 6H) | 25,59 | 0,81 (s, 6H) | 25,59 | 0,79 (s, 3H) | 25,40 | 1,66 (s, 3H) | 19,70 |

**Tabela 25.** Dados espectrais de HSQC e HMBC de ***Pc*-10** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz).

| **C** | **HSQC** | | | | **HMBC** | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$^2J$** | **$^3J$** |
| **1** | - | 32,12 | - | 32,12 | - | - |
| **2** | - | 30,54 | - | 30,54 | - | - |
| **3** | 3,28 (dd, J= 11,2; 4,4 Hz, 1H) | 79,00 | 3,28 (dd, J= 11,2; 4,4 Hz, 1H) | 79,00 | C-2; C-4 | C-1; C-29; C-30 |
| **4** | - | 40,64 | - | 40,64 | - | - |
| **5** | - | 47,27 | - | 47,27 | - | - |
| **6** | - | 21,27 | - | 21,27 | - | - |
| **7** | - | 26,63 | - | 26,63 | - | - |
| **8** | - | 48,13 | - | 48,13 | - | - |
| **9** | - | 20,15 | - | 20,15 | - | - |
| **10** | - | 26,25 | - | 26,25 | - | - |
| **11** | - | 26,16 | - | 26,16 | - | - |

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| **12** | - | 33,05 | - | 33,05 | - | - |
| **13** | - | 45,45 | - | 45,45 | - | - |
| **14** | - | 48,97 | - | 48,97 | - | - |
| **15** | - | 35,71 | - | 35,71 | - | - |
| **16** | - | 28,29 | - | 28,23 | | |
| **17** | - | 52,33 | - | 52,33 | - | - |
| **18** | 0,96 (s, 6H) | 18,18 | 0,96 (s, 6H) | 18,18 | C-13 | C-12; C-14; C-17 |
| **19** | 0,55 (d, J= 4,1 Hz); 0,33 (d, J= 4,2 Hz) | 30,03 | 0,55 (d, J= 4,1 Hz); 0,33 (d, J= 4,2 Hz) | 30,03 | C-9; C-10 | C-1; C-5; C-8 |
| **20** | - | 36,10 | - | 36,07 | - | - |
| **21** | 0,88 (s, 3H) | 18,48 | 0,88 (s, 3H) | 18,46 | C-20 | C-17; C-22 |
| **22** | - | 32,06 | - | 31,83 | - | - |
| **23** | - | 31,68 | - | 31,68 | - | - |
| **24** | 4,02 (t, J= 6,3 Hz, 1H) | 76,91 | 4,02 (t, J= 6,3 Hz, 1H) | 76,51 | C-25 | C-22; C-26; C-27 |
| **25** | - | 147,93 | - | 147,64 | - | - |
| **26** | 4,93 (ddd, J= 3,4; 1,8; 0,9 Hz), 1H<br>4,83 (q, J= 1,6 Hz, 1H) | 111,53 | 4,93 (ddd, J= 3,4; 1,8; 0,9 Hz), 1H<br>4,83 (q, J= 1,6 Hz, 1H) | 111,03 | C-25 | C-24; C-27 |
| **27** | 1,72 (s, 6H) | 17,75 | 1,72 (s, 6H) | 17,36 | C-25 | C-24; C-26 |
| **28** | 0,89 (s, 6H) | 19,47 | 0,89 (s, 6H) | 19,47 | C-14 | C-13; C-15 |
| **29** | 0,96 (s, 6H) | 14,15 | 0,96 (s, 6H) | 14,15 | C-4 | C-3; C-5 |
| **30** | 0,81 (s, 6H) | 25,59 | 0,81 (s, 6H) | 25,59 | C-4 | C-3; C-5 |

**Figura 105.** Espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-10 (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).

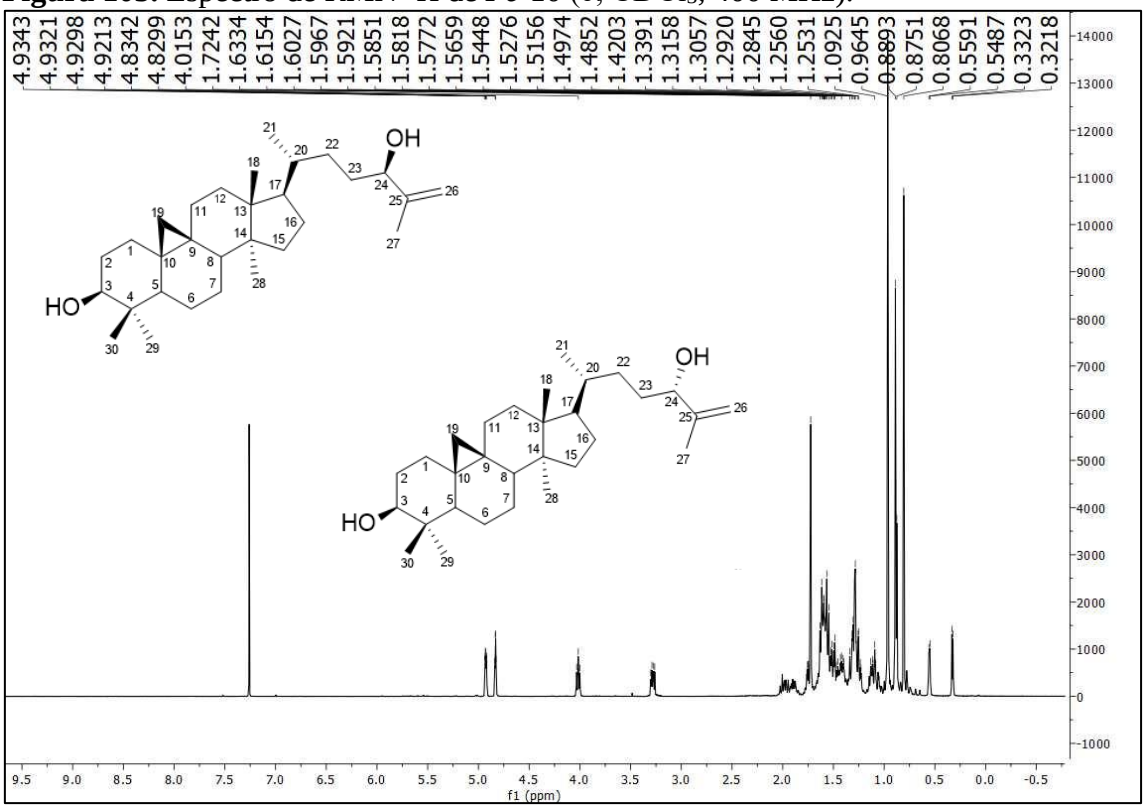



**Figura 106.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-10 (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).

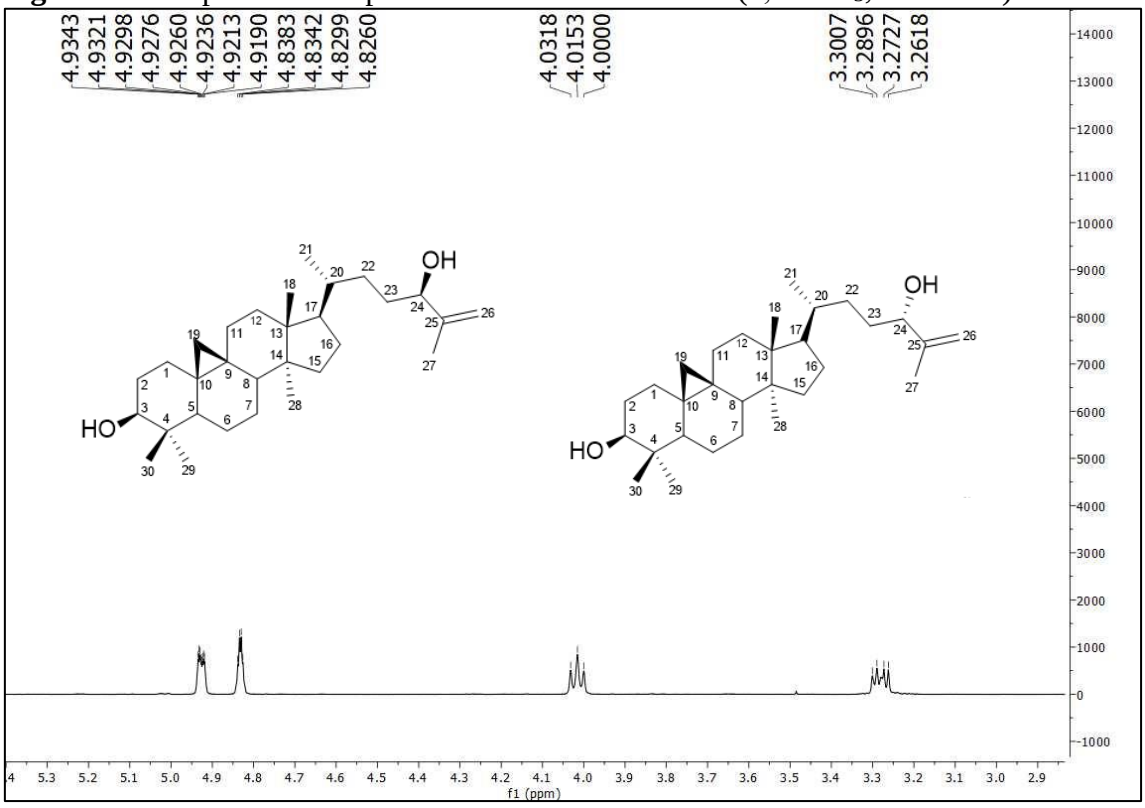


**Figura 107.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-10 (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).

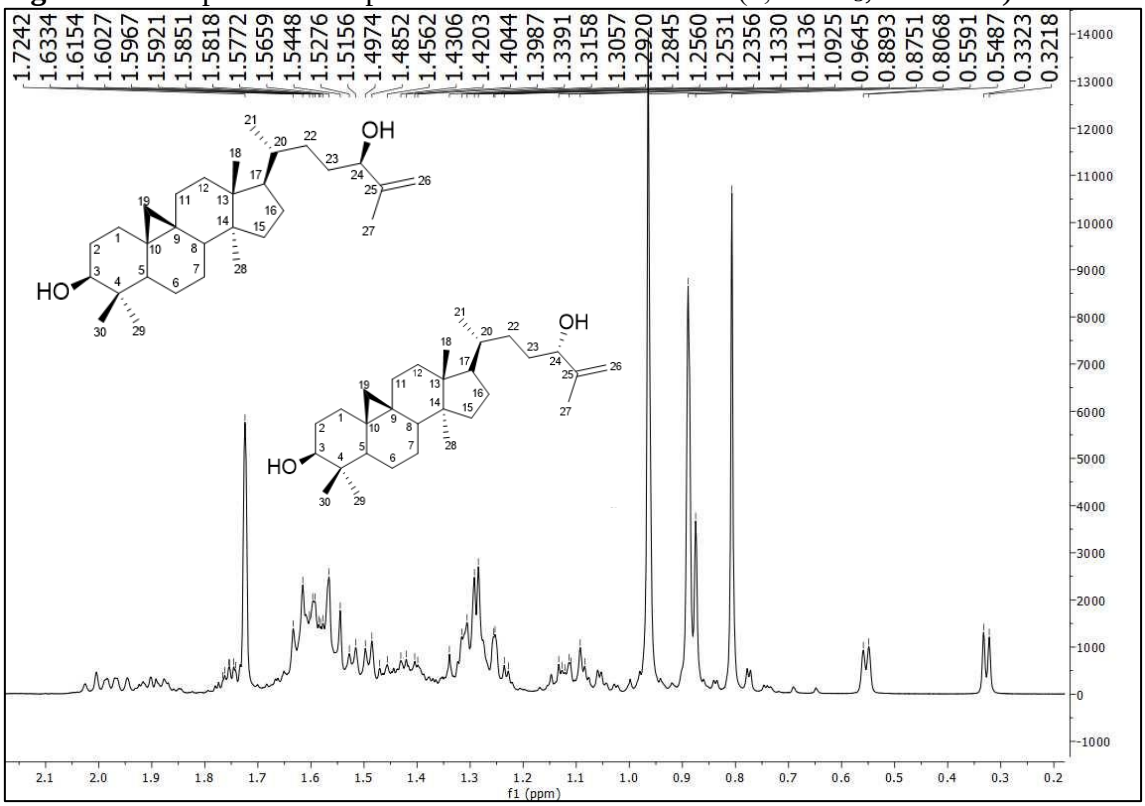



**Figura 108.** Espectro de RMN $^{13}C$-APT de *Pc*-10 (δ, $CDCl_3$, 100 MHz).

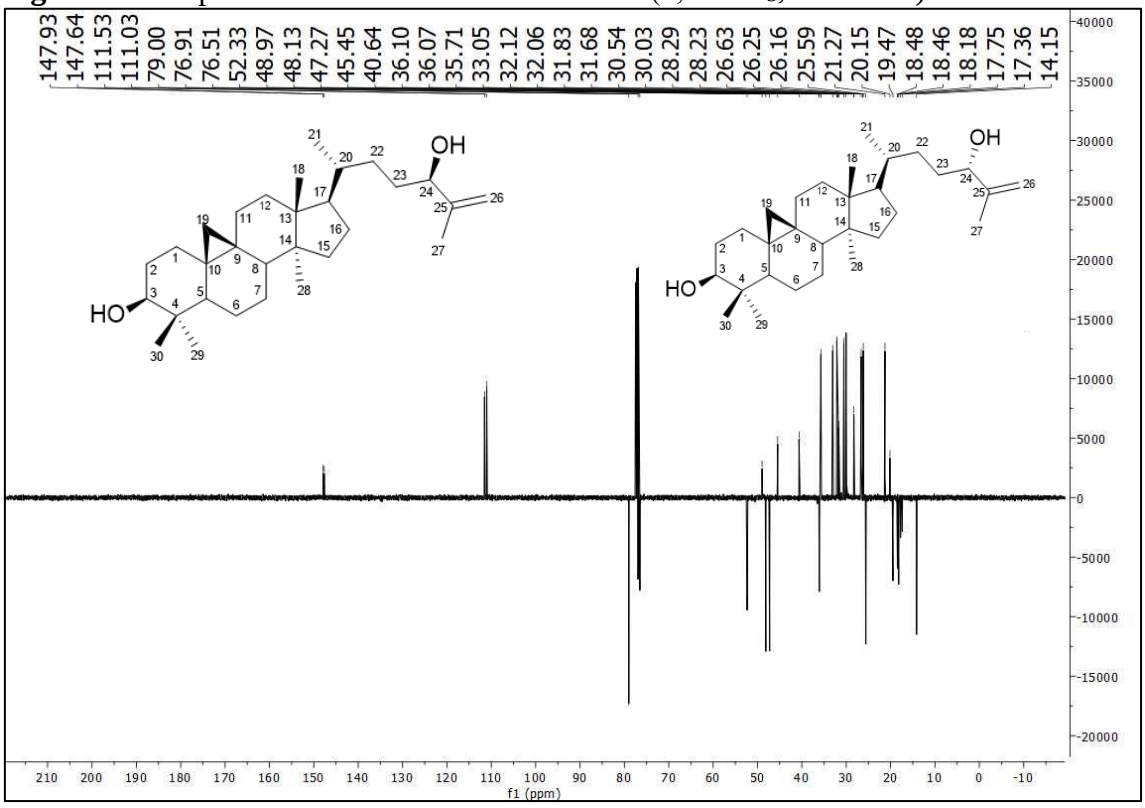


**Figura 109.** Expansão do espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-10 (δ, $CDCl_3$, 100 MHz).

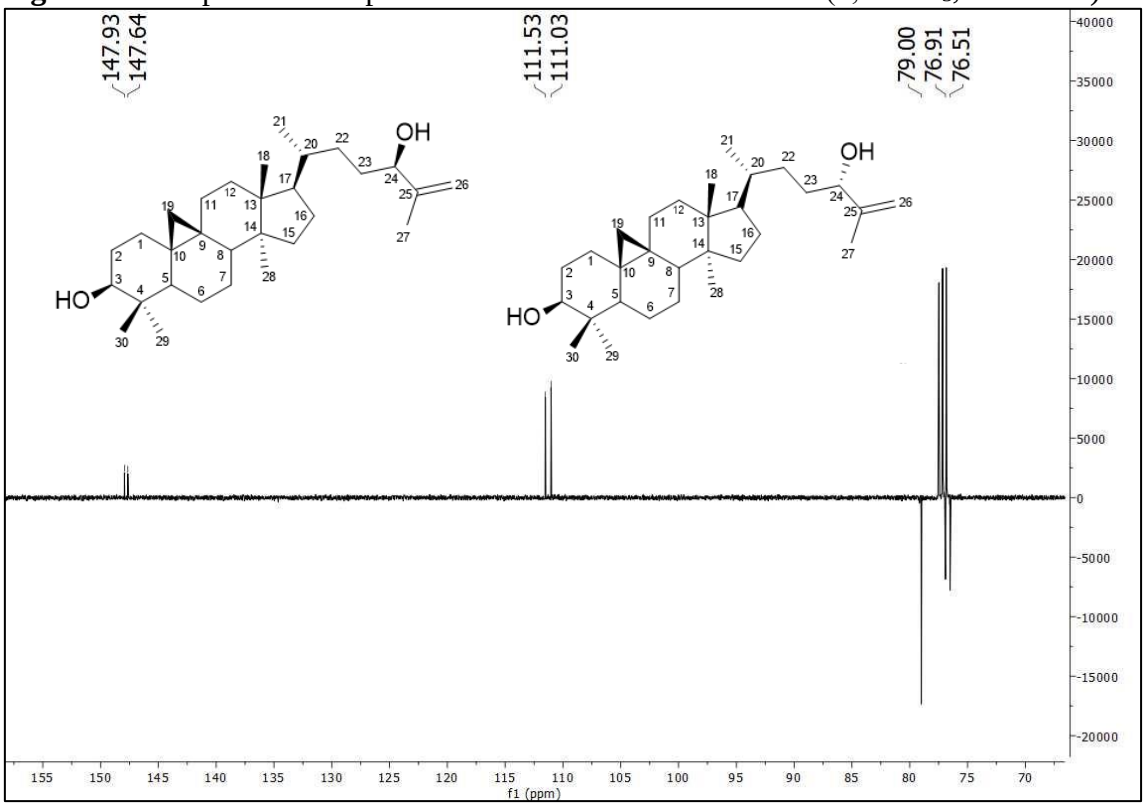



**Figura 110.** Expansão do espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-10 (δ, $CDCl_3$, 100 MHz).

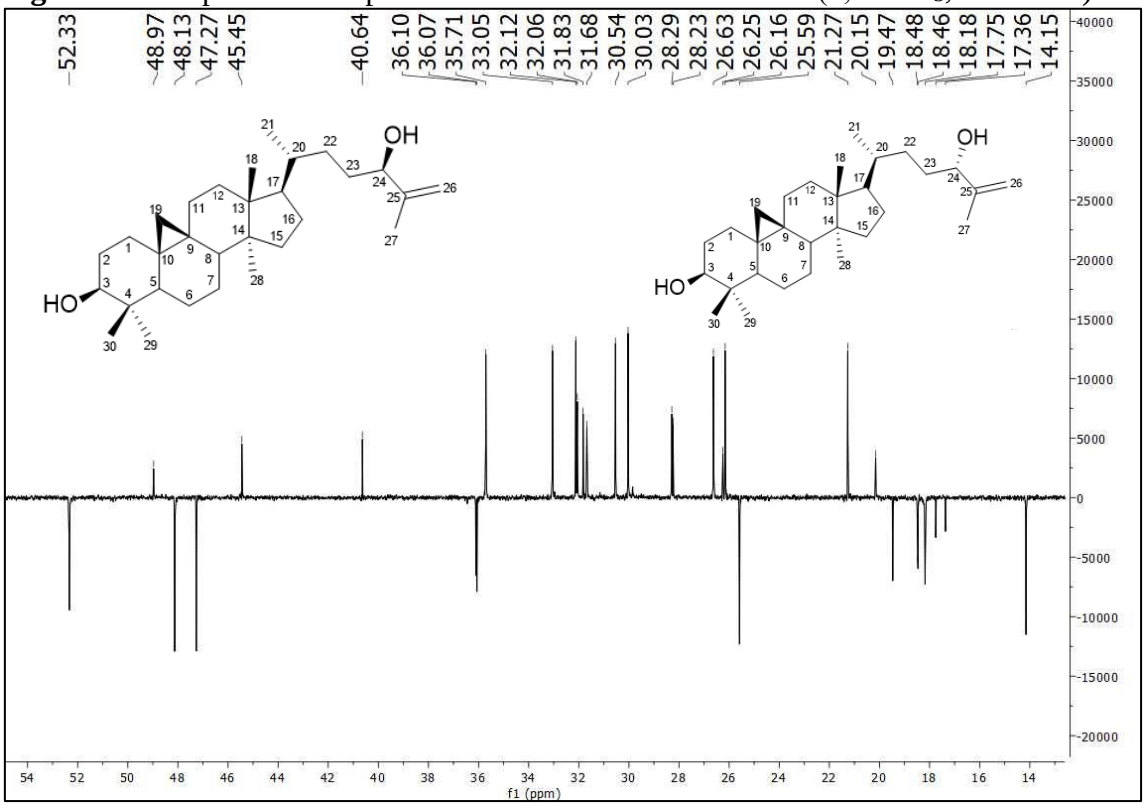


**Figura 111.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HSQC de *Pc*-10 (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz).

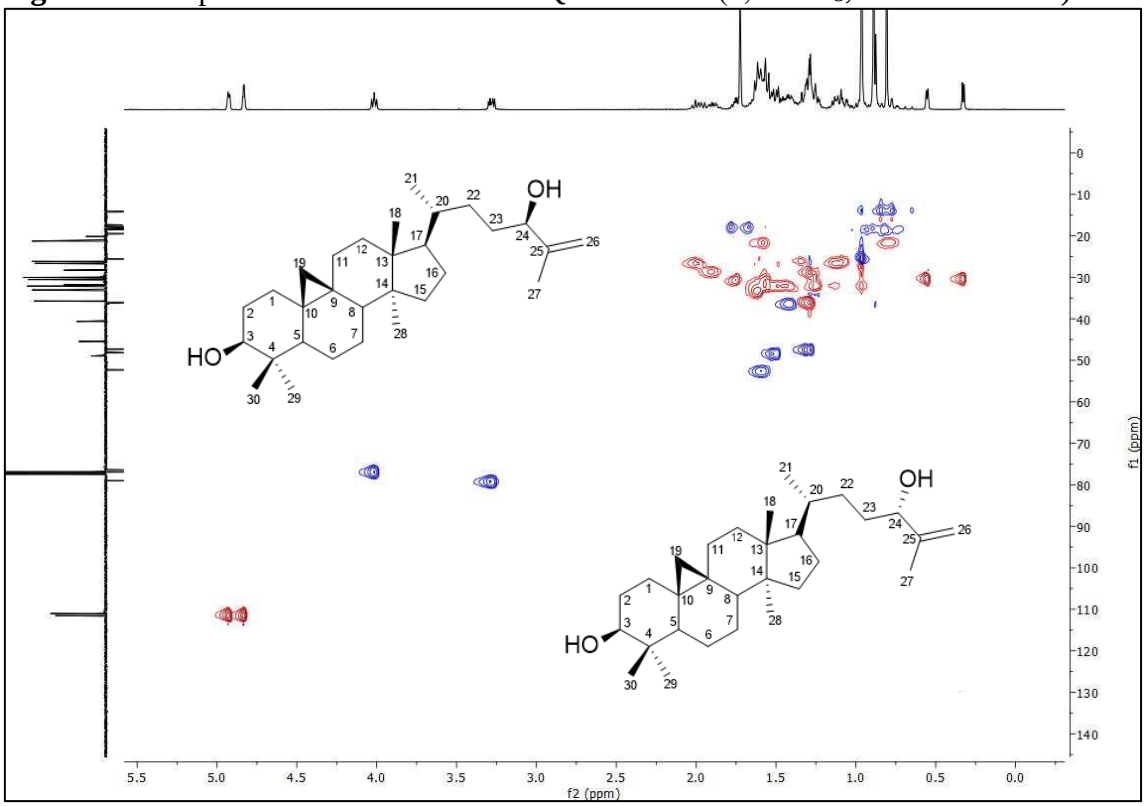



**Figura 112.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HMBC de *Pc*-10 (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz).

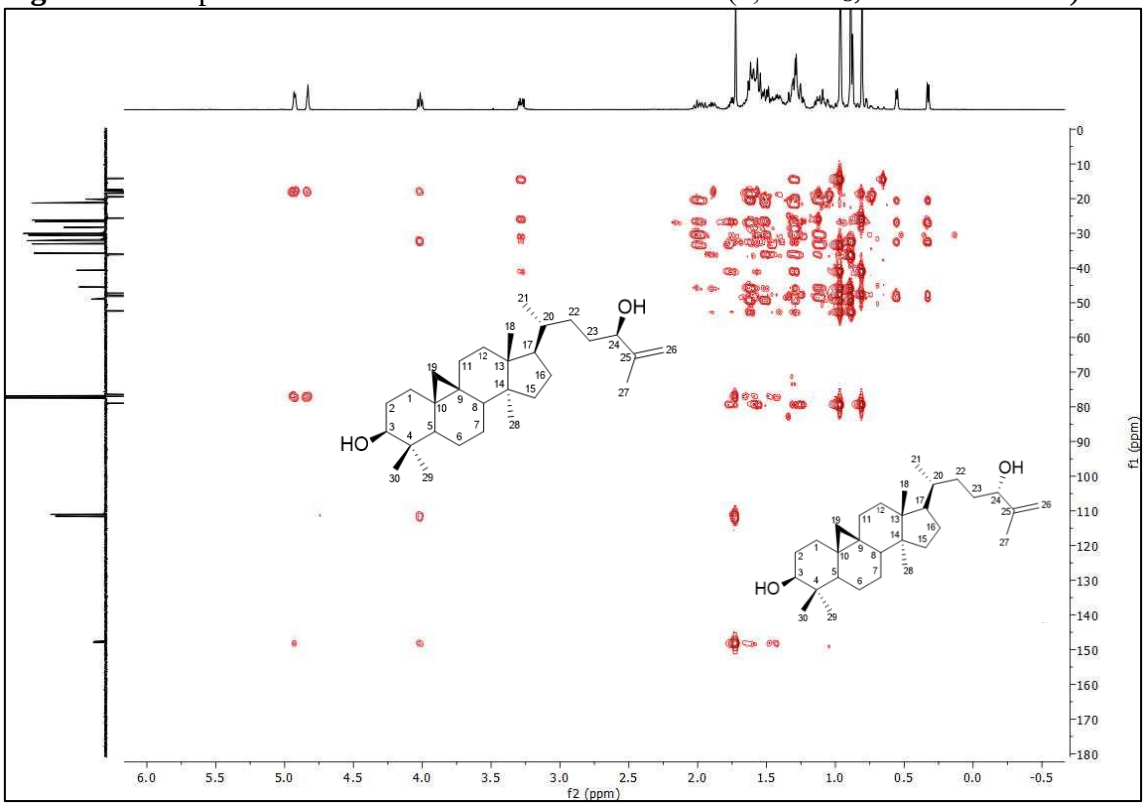
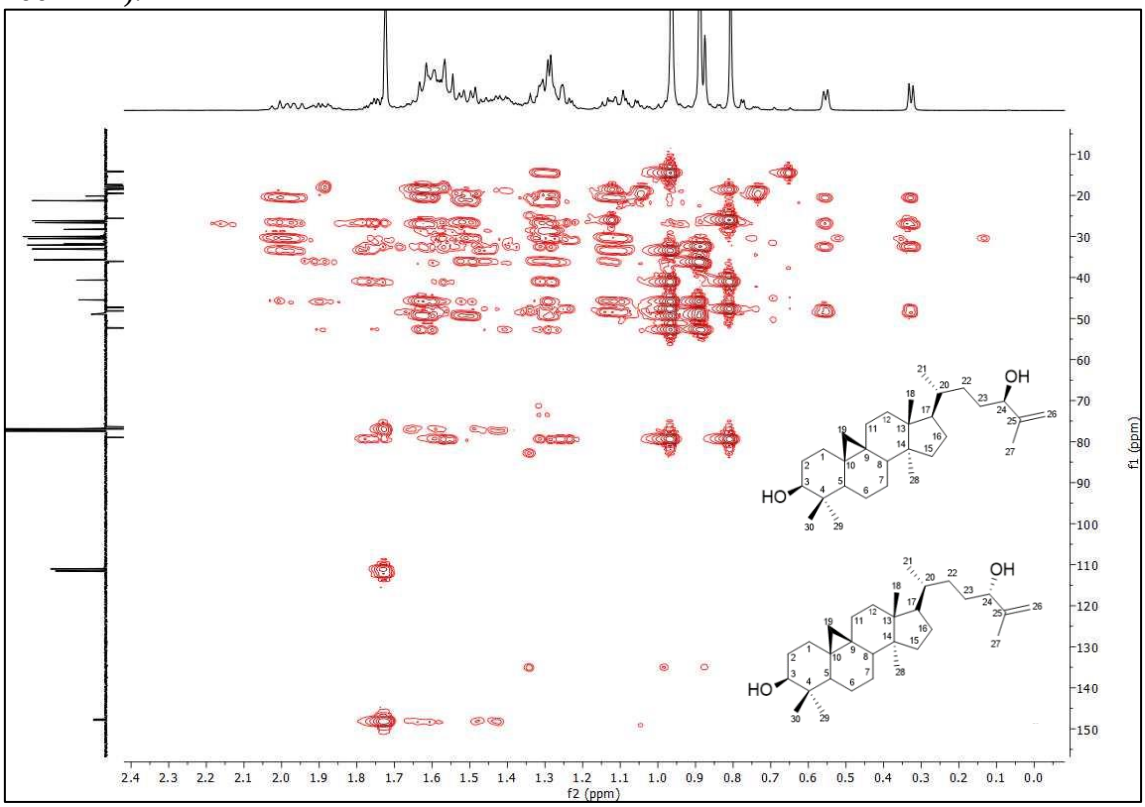


**Figura 113.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HMBC de *Pc*-10 (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz).




### 5.4.11 Determinação estrutural de *Pc*-11

A substância *Pc*-11 foi obtida na forma de um pó amarelo. A análise do espectro de RMN $^{1}H$ (δ, 400 MHz, $CD_3OD$) e de suas expansões (Figura 115, pág. 175) revelou sinais característicos de hidrogênios aromáticos, com absorções distribuídas entre $\delta_H$ 6,16 e $\delta_H$ 8,08, compatíveis com um sistema flavonoídico, conforme descrito na literatura (GOMES et al., 2011).

Destacam-se ainda dois dubletos em $\delta_H$ 6,89 e $\delta_H$ 8,08, ambos com constante de acoplamento orto ($J$ =8,8 Hz) e integrais correspondentes a dois hidrogênios cada, atribuídos aos hidrogênios H-2'/H-6' e H-3'/H-5', respectivamente, do anel B de flavonoides, caracterizando um sistema do tipo AA'BB' (CHAVES et al., 2017) (Figura 115, pág. 175).

Adicionalmente, observaram-se dois outros dubletos em $\delta_H$ 6,36 e $\delta_H$ 6,18, com constante de acoplamento meta ($J$ =2,0 Hz) e integração para um hidrogênio cada, sugerindo que o anel A da molécula flavonoídica apresenta substituições nas posições 5 e 7 (GOMES et al., 2011; CHAVES et al., 2013) (Figura 115, pág. 175).

A ausência de um sinal simpleto em torno de $\delta_H$ 6,63 (1H), tipicamente atribuído

ao hidrogênio na posição 3 do núcleo flavona (CHAVES et al., 2013), indicou que essa posição na substância em estudo, *Pc*-11, encontra-se substituída. Além disso, o espectro de RMN $^{1}$H não apresentou sinais correspondentes a hidrogênios de grupos metoxílicos ou carbinólicos (GOMES et al., 2011), indicando que os substituintes presentes nos anéis A, B e C são predominantemente grupos hidroxila. Com base nesses dados, foi possível propor que a substância *Pc*-11 corresponderia a um flavonoide do tipo flavonol, especificamente o canferol, uma 3,5,7,4'-tetrahidroxiflavona.

A análise do espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-11 (Figura 116, pág. 175) corroborou a presença de um núcleo flavonoídico, evidenciando 13 sinais, totalizando 15 átomos de carbono, o que se explica pela equivalência química de alguns carbonos aromáticos. Destacam-se os sinais em $\delta_C$ 130,6 e $\delta_C$ 116,2, atribuídos aos carbonos C-2'/C-6' e C-3'/C-5', respectivamente, os quais reforçam a presença de um sistema AA'BB' no anel B (Figura 117, pág. 176) (CHAVES et al., 2017).

Observou-se ainda um sinal em $\delta_C$ 177,3, característico de uma carbonila de cetona *α,β*-insaturada na posição C-4 do núcleo flavonoídico (GOMES et al., 2011), além de doze sinais correspondentes a carbonos aromáticos, sendo oito carbonos não hidrogenados e quatro carbonos monohidrogenados (Figura 116, pág. 175).

A atribuição do núcleo flavonoídico do tipo flavonol foi confirmada pela ausência dos sinais em $\delta_C$ 103,6 (C-3) e $\delta_C$ 163,7 (C-2), típicos de flavonas, conforme descrito por Chaves et al. (2017), mas sim pela presença dos sinais em $\delta_C$ 148,0 (C-2) e $\delta_C$ 137,1 (C-3), característicos do esqueleto flavonol e observados no espectro de *Pc*-11.

Dessa forma, a análise integrada dos dados espectroscópicos de RMN de $^{1}$H e $^{13}$C, unidimensionais, aliada à comparação com dados reportados na literatura (Tabela 26, pág. 174) e com padrões químicos disponíveis em laboratório, permitiu a identificação da substância *Pc*-11 como o 3,5,7,4'-tetrahidroxiflavona (canferol) (Figura 114, pág.174).

Este composto foi isolado e descrito pela primeira vez na espécie *P. cancellata*, tendo sido anteriormente relatado em *Herissantia crispa* (COSTA et al., 2009), *Sida rhombifolia* (CHAVES et al., 2017), *Waltheria viscosissima* (FERREIRA et al., 2020) e *Helicteres velutina* (FERNANDES et al., 2018).

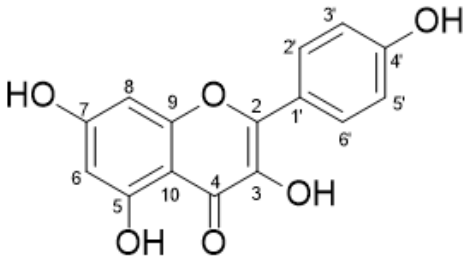



**Figura 114.** 3,5,7,4'-tetrahidroxiflavona (Canferol)

**Tabela 26.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-11** (δ, $CD_3OD$, 500 e 125 MHz) com modelo da literatura ***Mo*-1** (δ, $CD_3OD$, 500 e 125 MHz) (ALBUQUERQUE et al., 2025).

| **C** | ***Mo*-1** | | ***Pc*-11** | |
|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_H$** | | **$\delta_H$** | |
| **2** | - | 148,00 | - | 148,03 |
| **3** | - | 137,10 | - | 137,11 |
| **4** | - | 177,30 | - | 177,35 |
| **5** | - | 162,50 | - | 162,49 |
| **6** | 6,18 (d, *J* =2,0 Hz, 1H) | 99,30 | 6,16 (d, *J* =1,8 Hz, 1H) | 99,26 |
| **7** | - | 165,60 | - | 165,56 |
| **8** | 6,39 (d, *J* =2,0 Hz, 1H) | 94,40 | 6,37 (d, *J* =1,6 Hz, 1H) | 94,46 |
| **9** | - | 158,20 | - | 158,24 |
| **10** | - | 103,70 | - | 104,54 |
| **1'** | - | 123,70 | - | 123,72 |
| **2'** | 8,08 (d, *J* =8,9 Hz, 2H) | 130,60 | 8,07 (d, *J* =8,8 Hz, 2H) | 130,60 |
| **3'** | 6,90 (d, *J* =8,9 Hz, 2H) | 116,30 | 6,90 (d, *J* =8,9 Hz, 2H) | 116,29 |
| **4'** | - | 160,50 | - | 160,53 |
| **5'** | 6,90 (d, *J* =8,9 Hz, 2H) | 116,30 | 6,90 (d, *J* =8,9 Hz, 2H) | 116,29 |
| **6'** | 8,08 (d, J =8,9 Hz, 2H) | 130,60 | 8,07 (d, J =8,8 Hz, 2H) | 130,60 |

**Figura 115.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-11 (δ, $CD_3OD$, 500 MHz).

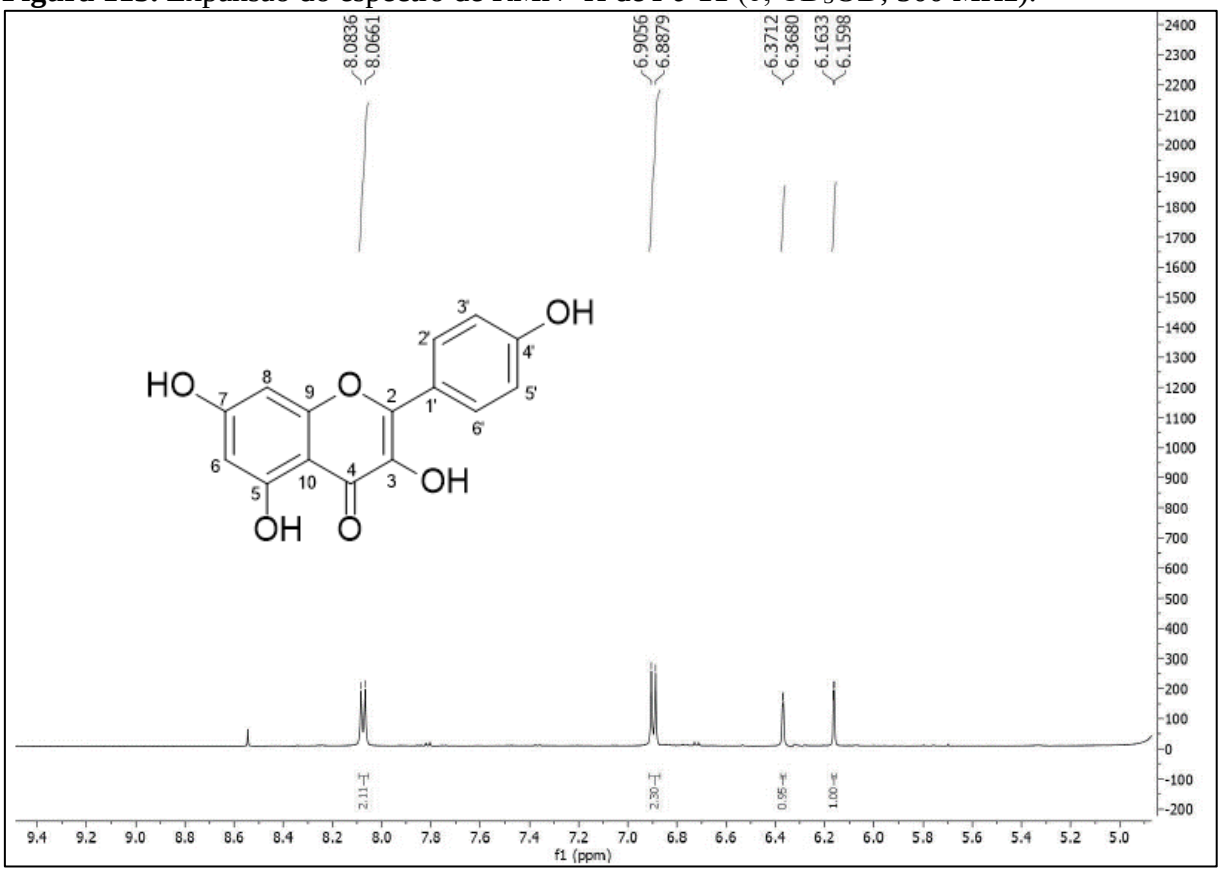



**Figura 116.** Espectro de RMN $^{13}C$-APT de *Pc*-11 (δ, $CD_3OD$, 125 MHz).

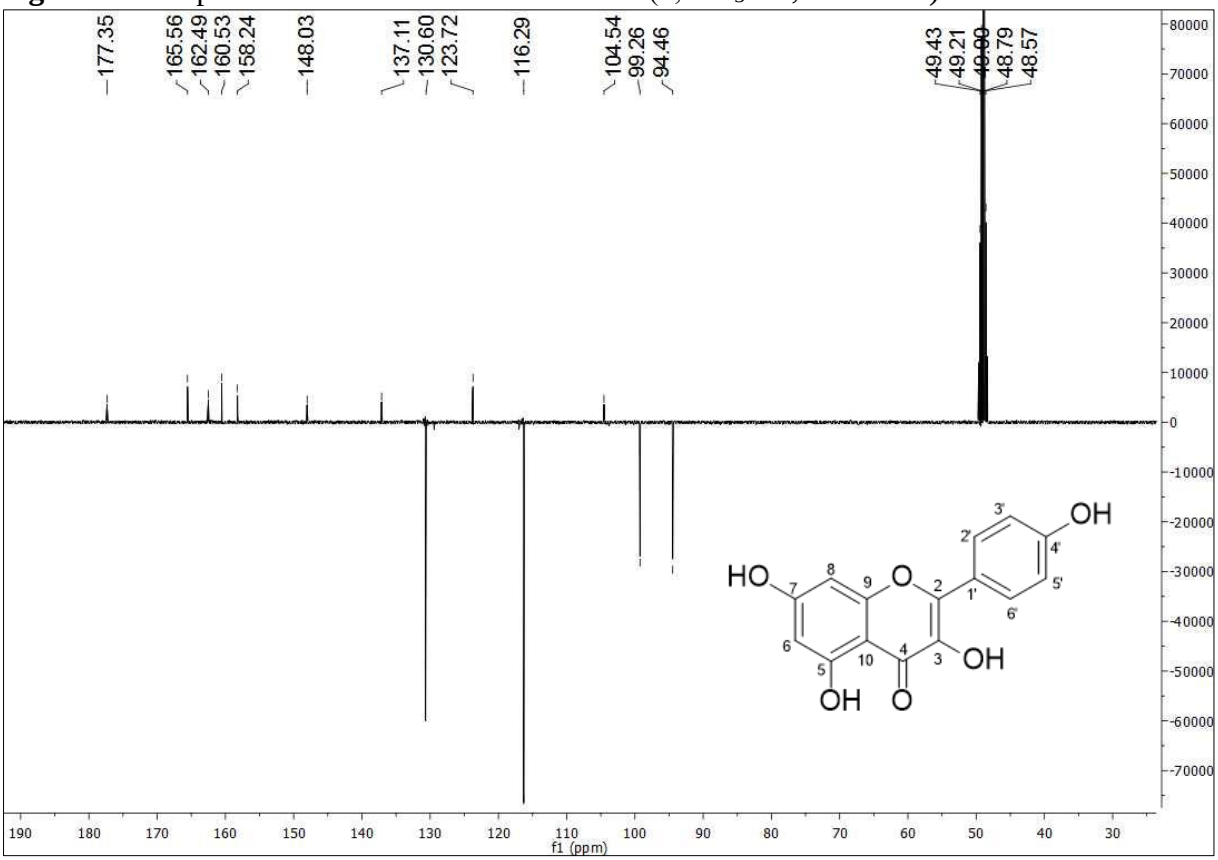
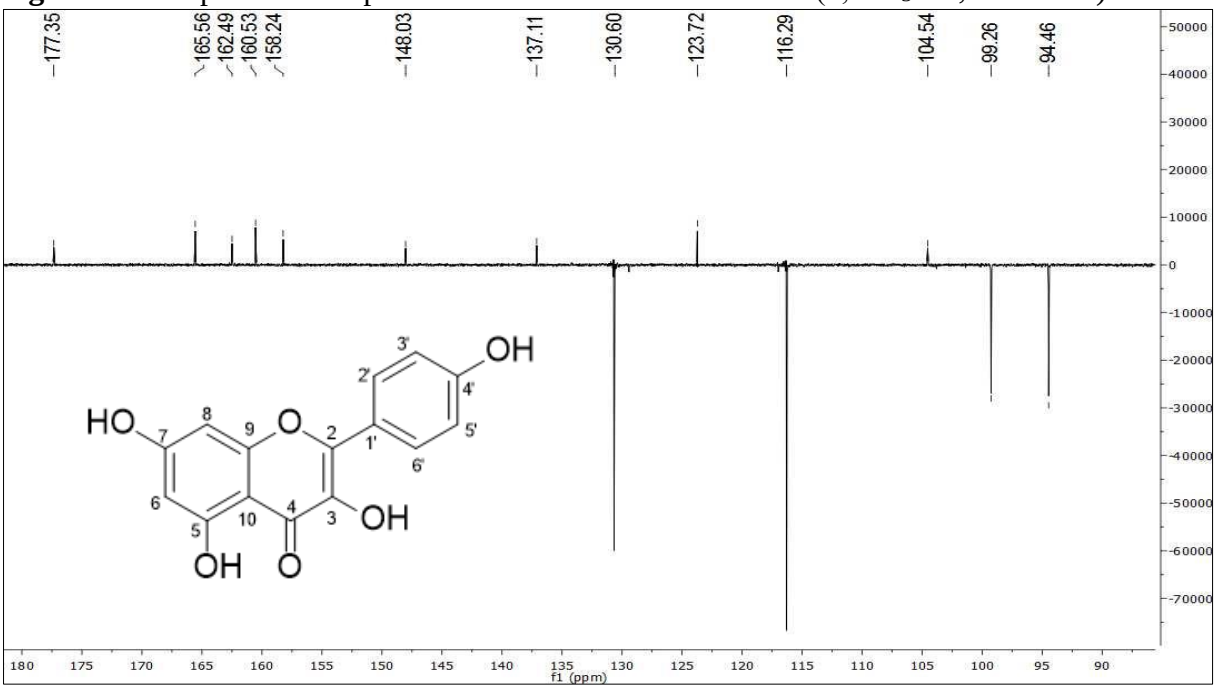


**Figura 117.** Expansão do espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-11 (δ, $CD_3OD$, 125 MHz).




### 5.4.12 Determinação estrutural de *Pc*-12

A substância codificada como *Pc*-12 foi obtida como um pó amarelado, que quando comparado por CCDA, ao padrão tilirosídeo, apresentou o mesmo fator de retenção (Rf) na placa cromatográfica, podendo tratar-se dessa substância, isolada de diversas espécies de Malvaceae, estudadas pela equipe.

Ao se analisar o espectro de RMN $^1$H de *Pc*-12 obtido a 400 MHz em $CD_3OD$ e suas expansões (Figura 119, pág. 179), observou-se a presença de dois dupletos referentes a hidrogênios aromáticos, em $\delta_H$ 7,99 ($J$ =8,9 Hz) e $\delta_H$ 6,82 ($J$ =8,7 Hz), integrando para dois hidrogênios cada e com constante de acoplamento *orto* (Figura 119, pág. 179). Esses sinais evidenciados foram atribuídos aos hidrogênios H-2'/H-6' e H-3'/H-5', respectivamente, sugerindo a presença de um sistema aromático AA'BB' correspondente ao anel B de flavonoides (MARQUES, et al., 2022).

Foram observados dois dupletos acoplados em posição *meta* com deslocamentos químicos em $\delta_H$ 6,13 ($J$ =2,2 Hz) e $\delta_H$ 6,31 ($J$ =2,2 Hz), com integração para um hidrogênio cada, condizentes aos hidrogênios H-6 e H-8 do anel A, respectivamente (Figura 119, pág. 176). Além disso, observou-se a presença de sinais referentes a uma unidade osídica ao exibir um dupleto em $\delta_H$ 5,24 ($J$ =7,4 Hz) condizente a um hidrogênio anomérico (H-1'') (Figura 119, pág. 179). Esta sugestão foi fortalecida pelas absorções

de hidrogênios oximetínicos entre $\delta_H$ 3,43 e $\delta_H$ 3,49, com presença de dois duplos dubletos em $\delta_H$ 4,30 e $\delta_H$ 4,19 ppm (Figura 119, pág. 179), condizentes com os hidrogênios oximetilênicos do carbono C-6'' da unidade de açúcar (SOBREIRA, 2023).

Foram visualizados dois outros dupletos em $\delta_H$ 6,07 e $\delta_H$ 7,40, com integrais para um hidrogênio cada acoplando em *trans* com um $J$ =15,8 Hz cada, sugerindo que esta substância também possui em sua estrutura uma unidade *p*-coumaroil, levantando a hipótese de que *Pc*-12 tratava-se realmente do tilirosídeo (ALBUQUERQUE et al., 2025).

O espectro de RMN $^{13}C$ sob a técnica APT, obtido a 100 MHz em $CD_3OD$ (Figura 120, pág. 179) mostrou a presença de 26 sinais equivalentes a 30 átomos de carbono. Foi comprovado um sinal em $\delta_C$ 179,4 típico de um grupo carbonílico em C-4 do anel C, bem como, a presença de substituintes oxigenados nos carbonos C-3 ($\delta_C$ 135,2), C-5 ($\delta_C$ 161,2), C-7 ($\delta_C$ 168,8), C-4' ($\delta_C$ 159,4) e C-4''' ($\delta_C$ 158,4) (Figura 120, pág. 176) (FERNANDES, et al., 2019), demonstrando valores semelhantes aos observados para *Pc*-7.

A proposta da unidade osídica para *Pc*-7 foi fortalecida pela absorção em $\delta_C$ 103,9, condizente com o carbono anomérico da glicose, além dos sinais referentes aos carbonos oximetínicos absorvendo em $\delta_C$ 64,3 e $\delta_C$ 77,9. A presença do grupo *p*-coumaroil foi ratificada pela expansão do espectro RMN $^{13}C$ ao exibir dois sinais intensos em $\delta_C$ 131,2 (C-2'''/6''') e $\delta_C$ 116,8 (C-3'''/5''') atribuídos ao seu sistema AA'BB'. A proposta de que esse grupo estaria ligado ao oxigênio do C-6'' da unidade de glicose, lançada pelo espectro de RMN $^{1}H$, foi ratificada pelo deslocamento desse carbono em $\delta_C$ 64,3, quando comparado ao carbono oximetilênico da glicose em $\delta_C$ 61,3 (Figura 120, pág. 179) (FERREIRA et al., 2019).

Após comparações dos dados espectrais de RMN $^{1}H$ e RMN $^{13}C$ comparados com os dados da literatura (Tabela 27, pág. 178), foi possível re-isolar e identificar o composto codificado como *Pc*-12, como sendo o canferol-3-*O*-*β*-D-(6''-*E*-*p*-coumaroil) glicopiranosídeo, conhecido como tilirosídeo (Figura 118, pág. 178), substância esta isolada anteriormente de várias espécies de Malvaceae *sensu lato* pela equipe (SILVA, et al., 2005, 2006; COSTA, et al., 2007; COSTA, et al., 2009; CAVALCANTE, et al., 2010; CASIMIRO-JÚNIOR, 2013; TELES, et al., 2015; MAZZOTTI, 2015; FERNANDES, et al., 2018; FERREIRA, et al., 2019; CHAVES, 2016; MARQUES et al., 2022; ALBUQUERQUE, 2025; SOBREIRA, 2023), e re-isolada de *Pavonia cancellata*.

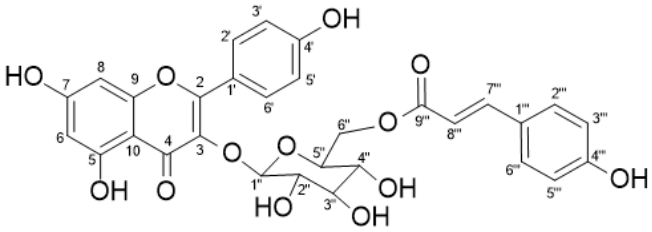


**Figura 118.** Canferol-3-*O*-*β*-D-(6’’-*E*-*p*-coumaroil) glicopiranosídeo (Tilirosídeo)

**Tabela 27.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-12** (δ, $CD_3OD$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (NHUNG et al., 2023).

| C | ***Mo*-1** | | ***Pc*-12** | |
|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** |
| **2** | - | 159,35 | - | 159,20 |
| **3** | - | 135,17 | - | 135,20 |
| **4** | - | 179,43 | - | 179,30 |
| **5** | - | 162,97 | - | 163,50 |
| **6** | 6,13 (d, *J* =2,1 Hz) | 100,00 | 6,15 (sl) | 100,30 |
| **7** | - | 165,98 | - | 166,90 |
| **8** | 6,31 (d, *J* =2,2 Hz) | 94,82 | 6,32 (sl) | 94,90 |
| **9** | - | 158,42 | - | 158,50 |
| **10** | - | 105,59 | - | 105,10 |
| **1’** | - | 122,73 | - | 122,80 |
| **2’** | 7,98 (d, *J* =6,9 e 2,0 Hz) | 132,20 | 8,01 (d, *J* =8,4 Hz) | 132,20 |
| **3’** | 6,82 (d, *J* =6,9 e 2,0 Hz) | 116,78 | 6,84 (d, *J* =8,4 Hz) | 116,00 |
| **4’** | - | 161,52 | - | 161,40 |
| **5’** | 6,82 (d, *J* =6,9 e 2,0 Hz) | 116,78 | 6,84 (d, *J* =8,4 Hz) | 116,00 |
| **6’** | 7,98 (d, *J* =6,9 e 2,0 Hz) | 132,20 | 8,01 (d, *J* =8,4 Hz) | 132,20 |
| **1’’** | 5,24 (d, *J* =7,7 Hz) | 103,93 | 5,24 (d, *J* =7,9 Hz) | 104,00 |
| **2’’** | 3,43 - 3,50 (m) | 75,71 | 3,49-3,47 (m) | 75,70 |
| **3’’** | 3,43 - 3,50 (m) | 78,00 | 3,49-3,47 (m) | 78,00 |
| **4’’** | 3,43 - 3,50 (m) | 71,72 | 3,33 (m) | 71,70 |
| **5’’** | 3,43 - 3,50 (m) | 75,80 | 3.49-3.47 (m) | 75,80 |
| **6’’** | 4,30 (dd, *J* =11,9, 2,3 Hz) e 4,19 (dd, *J* =11,9, 6,6 Hz) | 64,28 | 4,32- 4,19 (m) | 64,30 |
| **1’’’** | - | 127,09 | - | 127,10 |
| **2’’’** | 7,30 (d, *J* =8,6 Hz) | 131,18 | 7,33 (d, *J* =9,0 Hz) | 131,20 |
| **3’’’** | 6,79 (d, *J* =6,8 e 1,8 Hz) | 116,04 | 6,82 (d, *J* =8,4 Hz) | 116,80 |
| **4’’’** | - | 161,18 | - | 161,20 |
| **5’’’** | 6,79 (d, *J* =6,8 e 1,8 Hz) | 116,04 | 6,82 (d, *J* =8,4 Hz) | 116,80 |
| **6’’’** | 7,30 (d, *J* =8,6 Hz) | 131,18 | 7,33 (d, *J* =9,0 Hz) | 131,20 |
| **7’’’** | 7,40 (d, *J* =15,9 Hz) | 146,55 | 7,42 (d, *J* =15,6 Hz) | 146,60 |
| **8’’’** | 6,07 (d, *J* =15,9 Hz) | 114,73 | 6,09 (d, *J* =15,6 Hz) | 114,70 |
| **9’’’** | - | 168,78 | - | 168,80 |

**Figura 119.** Espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-12 (δ, $CD_3OD$, 400 MHz).

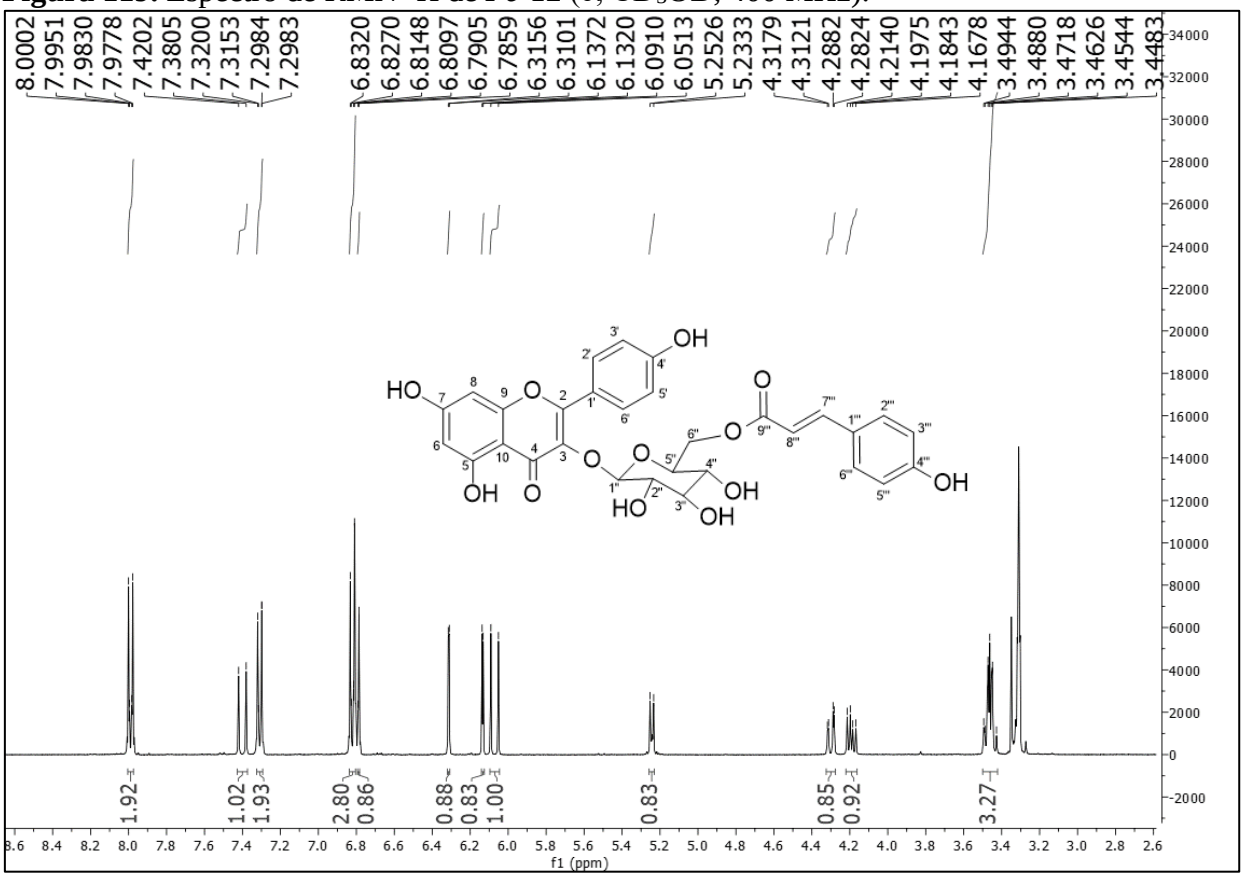



**Figura 120.** Espectro de RMN $^{13}C$ de *Pc*-12 (δ, $CD_3OD$, 100 MHz).

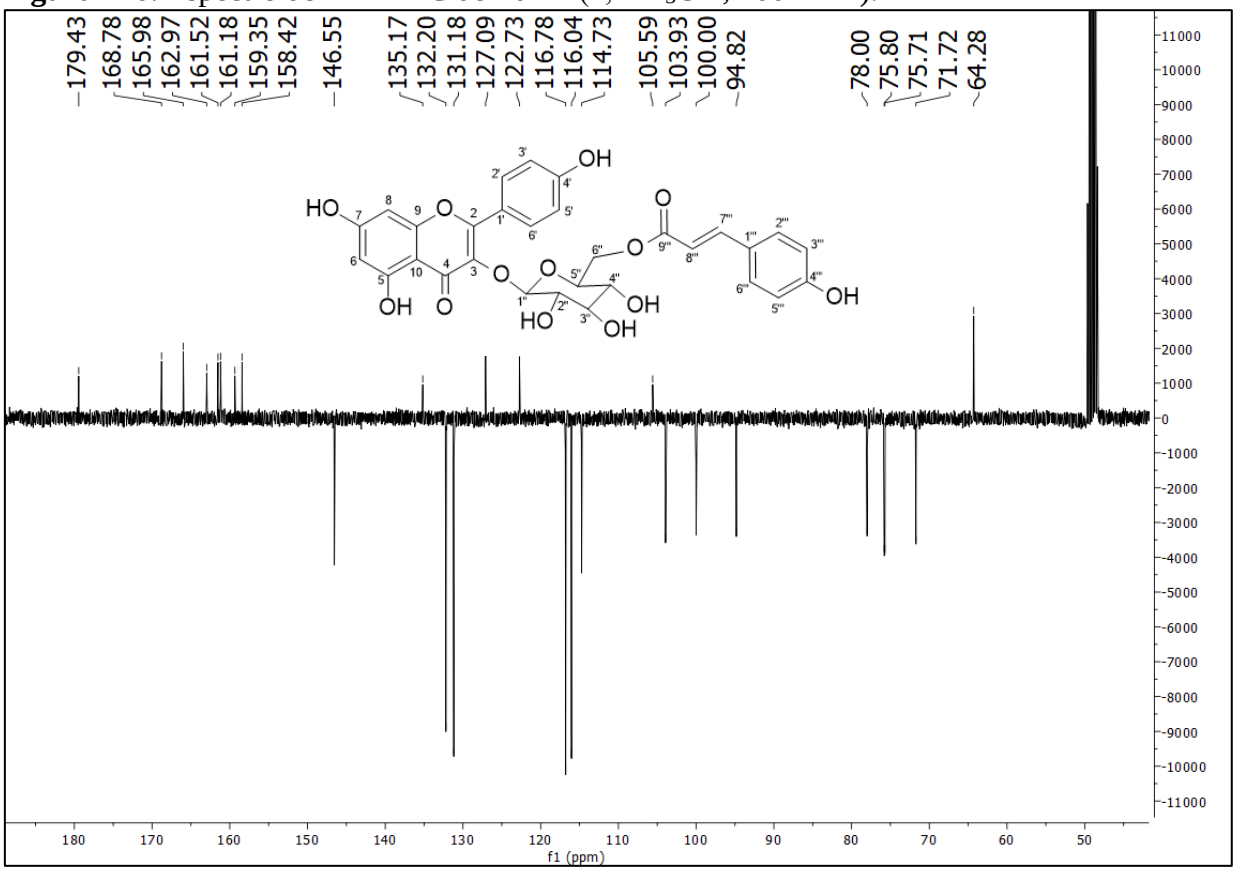
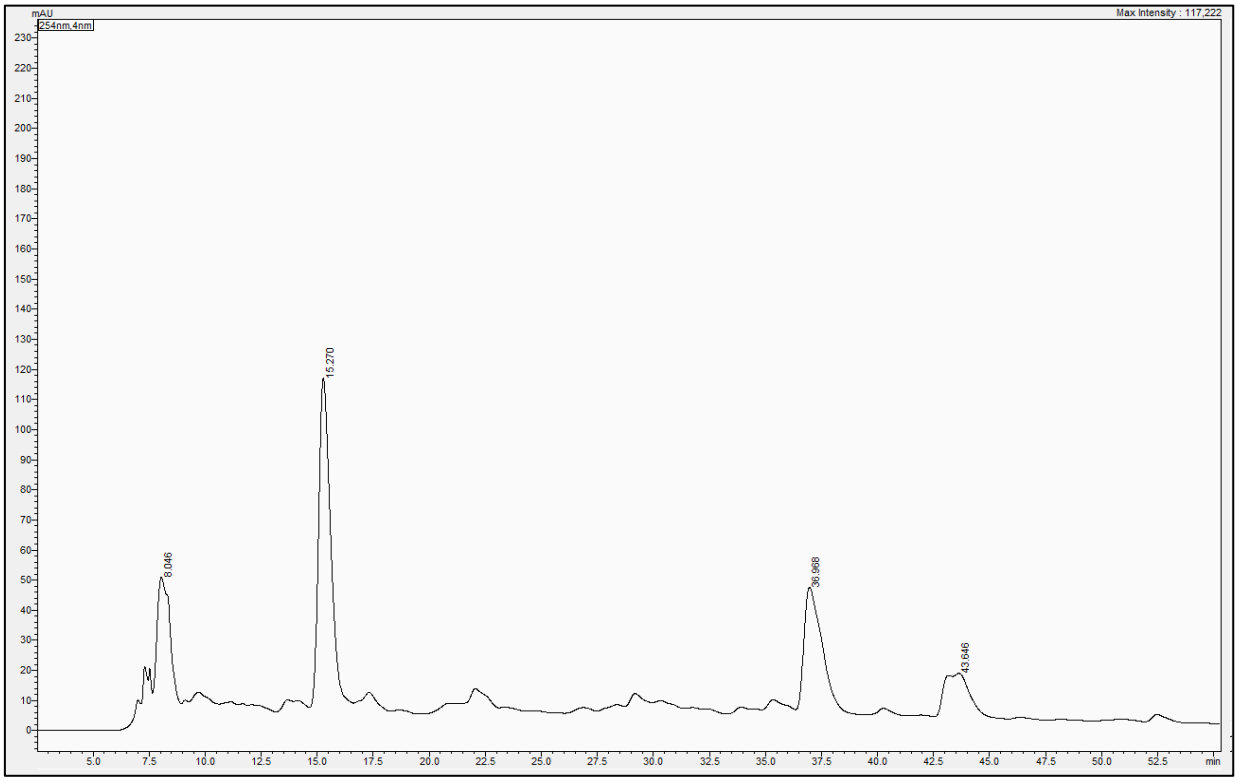


**Figura 121.** Cromatograma da fração 06/08 da fase acetato de etila do EEB das partes aéreas de *Pavonia cancellata*.




### 5.4.13 Determinação estrutural de *Pc*-13

A substância codificada como *Pc*-13 apresentou-se na forma de um pó amarelado. Em seu cromatograma apresenta-se como o primeiro pico com tempo de retenção de 8,046 minutos (Figura 121, pág. 180). Seu espectro de RMN $^{1}H$ foi obtido a 400 MHz em $CD_3OD$ (Figura 123, pág. 183).

A partir de suas expansões foram observados dois duplos dupletos em $\delta_H$ 8,03 ($J$ =6,8 e 2,0 Hz) e $\delta_H$ 6,88 ($J$ =6,9 e 2,0 Hz) com integral para dois hidrogênios cada, acoplando *orto* e *meta*. atribuídos aos conjuntos de hidrogênios H-2'/H-6' e H-3'/H-5', respectivamente demonstrando assim a presença de um sistema AA'BB' (Figura 123, pág. 183), estando este último par de hidrogênios mais protegidos por estarem em posição *orto* ao grupo doador de elétrons (-OH) da posição C-4´, sugerindo para *Pc*-13 um esqueleto do tipo flavonoídico com anel B *para* substituído (SILVERSTEIN; WEBSTER; KIEMLE, 2005).

A molécula *Pc*-13 demonstrou possuir o anel A dissubstituído, uma vez que foram observados dois dupletos acoplando em posição *meta* com deslocamentos químicos em $\delta_H$ 6,18 ($J$ =1,1 Hz) e $\delta_H$ 6,04 ($J$ =2,0 Hz), condizentes aos hidrogênios H-6 e H-8 do

referido anel, respectivamente (Figura 124, pág. 183). A ausência de um simpleto em aproximadamente $\delta_H$ 6,80 característico do hidrogênio da posição 3 de flavonas, indicou que a posição 3 do anel C poderia estar substituída (DANTAS, 2018).

Foram evidenciados deslocamentos químicos característicos de região de açúcar entre $\delta_H$ 3,0 e $\delta_H$ 4,0 ppm, levando a sugerir que a unidade osídica poderia estar inserida na posição 3 (Figura 125, pág. 184). O espectro de RMN $^1$H exibiu ainda um dupleto em $\delta_H$ 5,37 com integral para um hidrogênio e com constante de acoplamento igual a 7,5 Hz (Figura 125, pág. 184) referente ao hidrogênio anomérico sugerindo assim que *Pc*-13 tratava-se de um *β*-glicosídeo. A sugestão da presença da unidade glicosídica foi fortalecida pela presença de dois duplos dupletos no espectro de RMN $^1$H em $\delta_H$ 3,68 (*J* =11,8 e 2,4 Hz) e $\delta_H$ 3,56 (dd, *J* =11,9 e 5,2 Hz) (Figura 125, pág. 184), condizentes com os hidrogênios metilênicos ligados ao carbono C-6'' da glicose (GHAVAM-HAGHI & DINANI, 2017).

Dados de RMN $^1$H de *Pc*-13 foram comparados com *Pc*-12 demonstrando que a principal diferença entre ambas as estruturas se devia à ausência do grupo *p*-coumaroil ligado à glicose, sugerindo que *Pc*-13 tratar-se-ia do canferol glicosilado (SOBREIRA, 2023).

O espectro de RMN $^{13}$C sob a técnica APT, obtido a 100 MHz em $CD_3OD$ (Figura 126, pág. 184) corroborou a proposta fornecida de que *Pc*-13 se trataria de um flavonoide glicosilado. Foram observados 19 sinais de carbono correspondentes aos 21 sinais de carbono da estrutura química, dos quais se atribuíram a um carbono metilênico, onze carbonos metínicos e nove carbonos não hidrogenados.

Sinais em $\delta_C$ 132,1, $\delta_C$ 116,3 e $\delta_C$ 162,2 foram condizentes aos sinais dos carbonos do anel B de flavonoides, sendo eles: C-2'/C-6', C-3'/C-5' e C-4', respectivamente. A presença de um sinal em $\delta_C$ 178,3 foi atribuída ao deslocamento químico do grupo carbonila de cetona do anel C e os sinais em $\delta_C$ 135,1 e $\delta_C$ 157,9 foram compatíveis com os sinais de carbono *α* e *β*-carbonila das posições C-3 e C-2, respectivamente do anel C (Figura 126, pág. 184). A ausência de um sinal próximo a $\delta_C$ 103,0 ppm em núcleo de flavona, confirmou assim a substituição do carbono na posição C-3. Sinais da unidade osídica foram confirmados através dos deslocamentos químicos em $\delta_C$ 105,1, $\delta_C$ 75,6, $\delta_C$ 78,1, $\delta_C$ 71,2, $\delta_C$ 78,2, e $\delta_C$ 62,5 ppm (Figura 126, pág. 184) (DANTAS, 2018).

A análise dos dados espectrais de RMN $^1$H e RMN $^{13}$C com comparações com os dados da literatura (Tabela 28, pág. 182) permitiu identificar *Pc*-13 como sendo a estrutura canferol 3-*O*-*β*-D-glicopiranosídeo, também conhecido como astragalina

(Figura 122, pág. 182). Este flavonoide glicosilado já foi isolado anteriormente em espécies como *Wissadula periplocifolia* (TELES et al., 2015), *Pavonia malacophylla* (ALBUQUERQUE et al., 2025) e pela primeira vez na espécie em estudo.

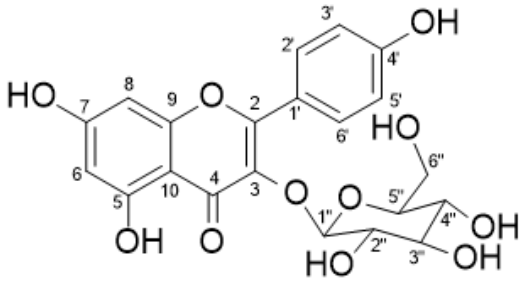



**Figura 122.** Canferol-3-*O*-*β*-D-glicopiranosídeo (Astragalina)

**Tabela 28.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-13** (δ, $CD_3OD$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** (δ, $CD_3OD$, 500 e 125 MHz) (DANTAS, 2018).

| C | ***Mo*-1** | | ***Pc*-13** | |
|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** |
| **2** | - | 158,5 | - | 159,2 |
| **3** | - | 135,4 | - | 135,1 |
| **4** | - | 179,5 | - | 178,3 |
| **5** | - | 163,0 | - | 162,3 |
| **6** | 6,20 (d, *J* =2,0 Hz) | 99,9 | 6,04 (d, *J* =2,0 Hz) | 102,9 |
| **7** | - | 165,9 | - | 162,4 |
| **8** | 6,40 (d, *J* =2,0 Hz) | 94,7 | 6,18 (d, *J* =1,1 Hz) | 97,1 |
| **9** | - | 159,1 | - | 158,0 |
| **10** | - | 105,7 | - | 105,1 |
| **1'** | - | 122,7 | - | 122,5 |
| **2'** | 8,04 (d, *J* =8,8 Hz) | 132,2 | 8,04 (dd, *J* =6,8 e 2,0 Hz) | 132,1 |
| **3'** | 6,88 (d, *J* =8,8 Hz) | 116,0 | 8,04 (dd, *J* =6,9 e 2,0 Hz) | 116,4 |
| **4'** | - | 161,5 | - | 162,2 |
| **5'** | 6,88 (d, *J* =8,8 Hz) | 116,0 | 8,04 (dd, *J* =6,9 e 2,0 Hz) | 116,4 |
| **6'** | 8,04 (d, *J* =8,8 Hz) | 132,2 | 8,04 (dd, *J* =6,8 e 2,0 Hz) | 132,1 |
| **1''** | 5,23 (d, *J* =7,6 Hz) | 104,0 | 5,04 (d, *J* =7,5 Hz) | 103,1 |
| **2''** | 3,17-3,21 (m) | 75,7 | 3,18-3,23 (m) | 75,7 |
| **3''** | 3,27-3,45 (m) | 78,0 | 3,35-3,50 (m) | 78,1 |
| **4''** | 3,27-3,45 (m) | 71,3 | 3,35-3,50 (m) | 71,2 |
| **5''** | 3,27-3,45 (m) | 78,4 | 3,35-3,50 (m) | 78,2 |
| **6''** | 3,51 (dd, *J* =12,0 e 5,6 Hz) | 62,6 | 3,56 (dd, *J* =12,0 e 5,2 Hz) | 62,5 |
| | 3,68 (dd, *J* =12,0 e 2,4 Hz) | | 3,68 (dd, *J* =11,8 e 1,7 Hz) | |

**Figura 123.** Espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-13 (δ, $CD_3OD$, 400 MHz).

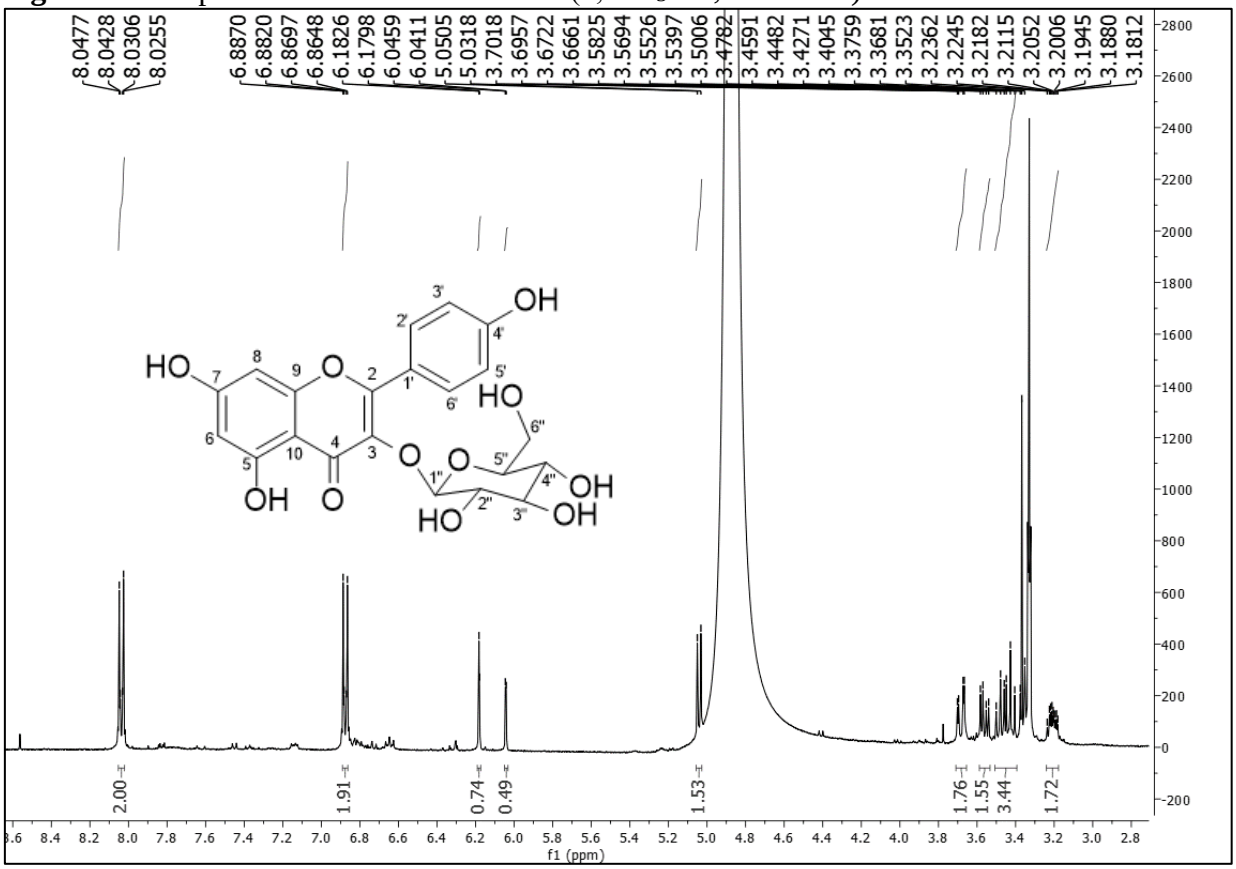



**Figura 124.** Expansão do espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-13 na região entre 5,0 e 8,0 ppm (δ, $CD_3OD$, 400 MHz).

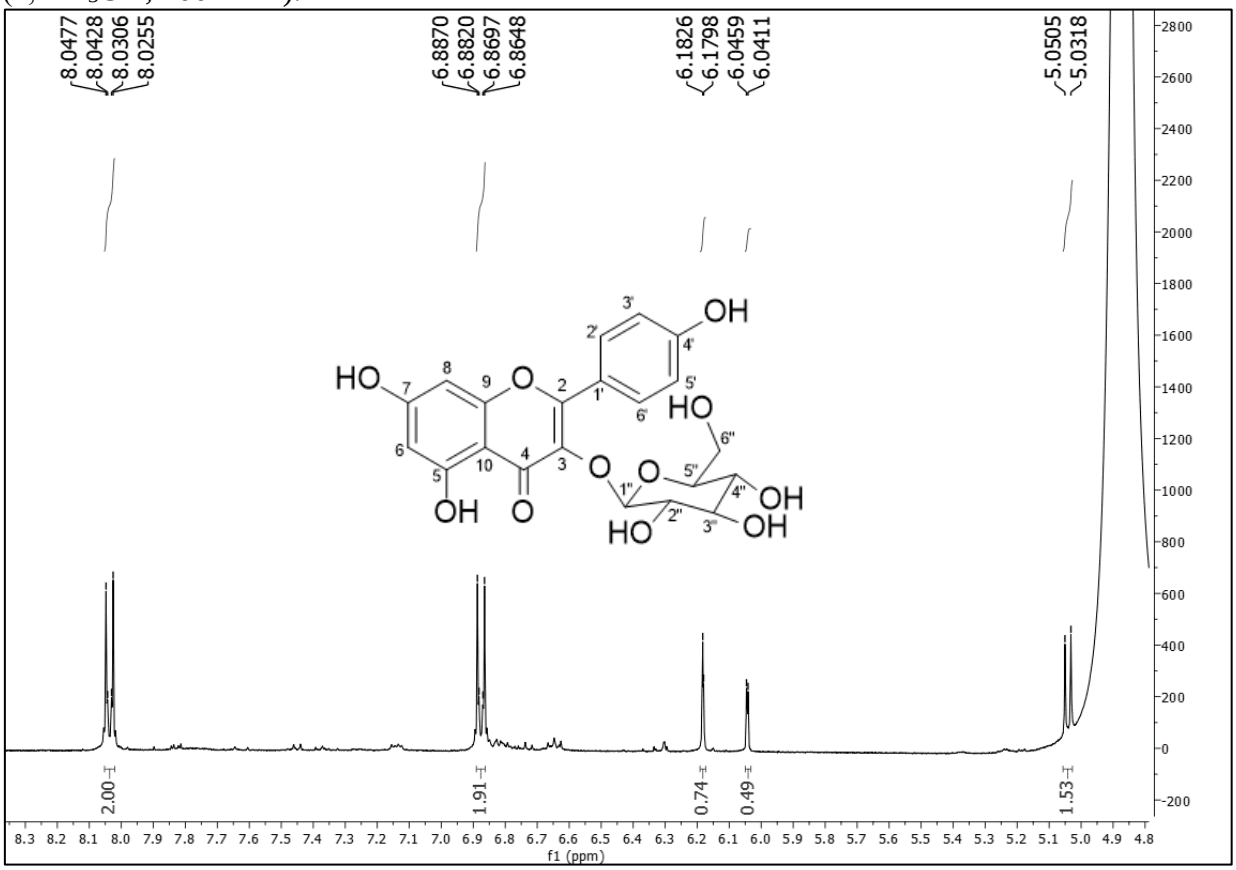


**Figura 125.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-13 na região entre 3,1 e 3,7 ppm (δ, $CD_3OD$, 400 MHz).

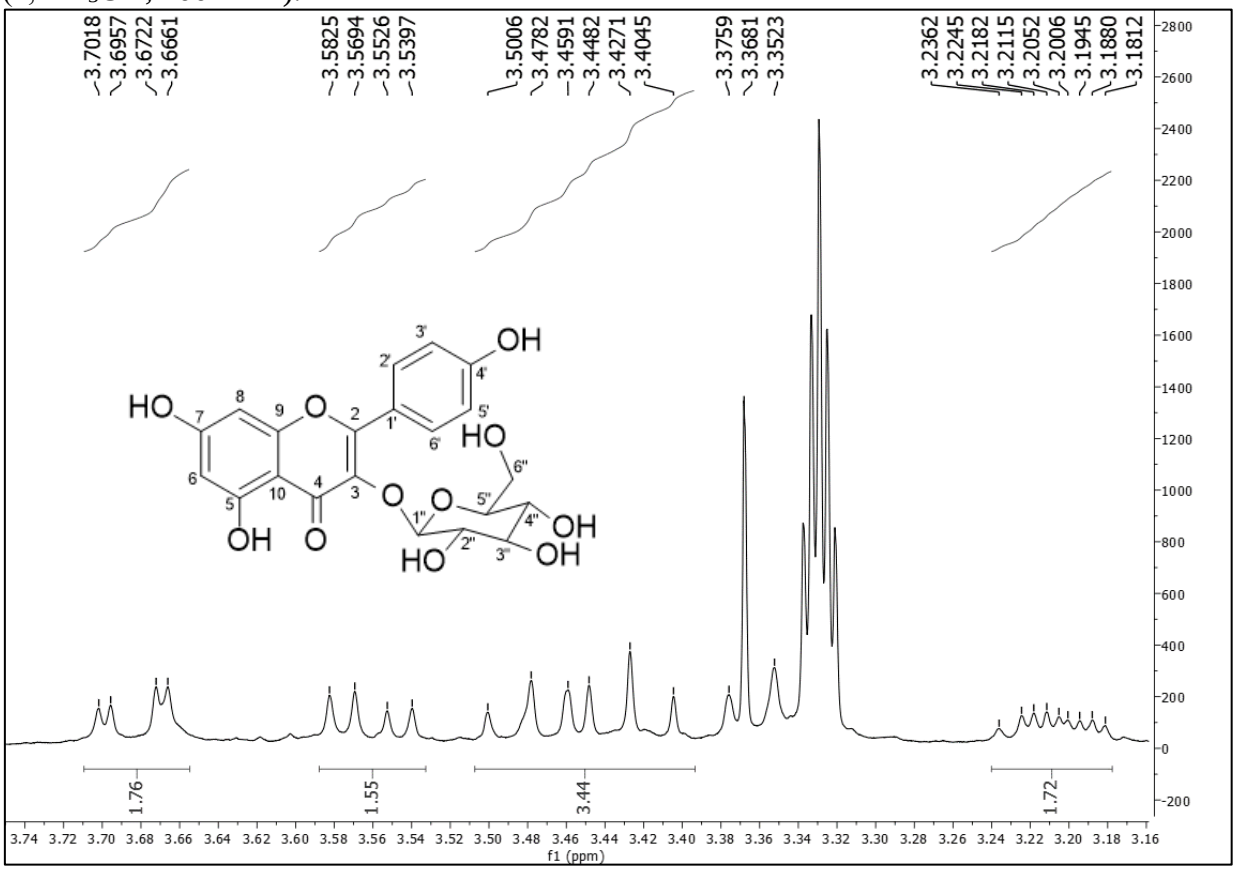
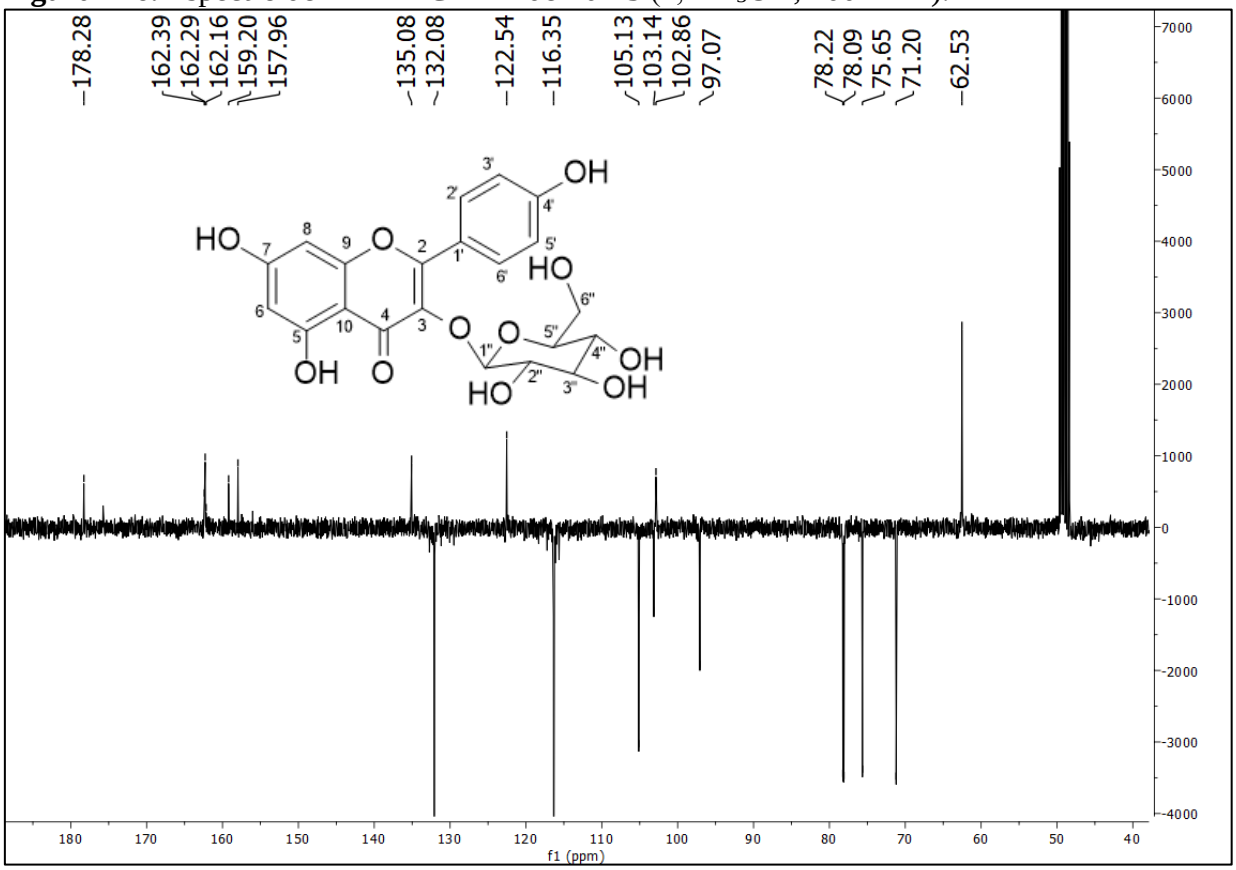



**Figura 126.** Espectro de RMN $^{13}C$-APT de *Pc*-13 (δ, $CD_3OD$, 100 MHz).



### 5.4.14 Determinação estrutural de *Pc*-14

A substância *Pc*-14 foi obtida na forma de um pó amarelo. Em seu cromatograma apresenta-se como o segundo pico com tempo de retenção de 15,270 minutos (Figura 121, pág. 180). Ao analisar suas expansões foi evidenciado a presença de dois simpletos em $\delta_H$ 12,35 e 12,33 ppm característico de hidrogênios de hidroxilas fenólicas da posição C-5 formando ligação de hidrogênio intramolecular com a carbonila em C-4 do anel C de flavonoides (FERREIRA et al., 2019) (Figura 129 e 130, pág. 189).

Seu espectro de RMN de $^1$H e suas expansões revelaram ainda sinais compatíveis com uma mistura de flavonoides glicosilados ambos derivados da quercetina. Na região aromática observaram-se cinco sinais característicos do núcleo flavonol. Foram observados dois dupletos acoplando em meta em $\delta_H$ 6,20 ($J$ =2,1 Hz) e $\delta_H$ 6,38 ($J$ =2,2 Hz), correspondentes aos hidrogênios H-6 e H-8 do anel A de flavonoides, respectivamente (Figura 131, pág. 190). Porém foram evidenciados um dupleto em $\delta_H$ 6,87 ($J$ =8,4 Hz), um duplo-dupleto em $\delta_H$ 7,63 ($J$ =8,4 e 2,0 Hz) e um dupleto em 7,67 ($J$ =2,0 Hz), típico de um sistema ABX 3',4'-dihidroxissubstituído para o anel B do núcleo flavonoídico (NAPOLITANO et al., 2012) (Figura 130, pág. 189).

Acrescentando-se a estes dados, outro sistema ABX foi observado, com um dupleto em $\delta_H$ 6,87 ($J$ =8,4 Hz), um duplo dupleto em $\delta_H$ 7,63 ($J$ =8,4; 2,0 Hz) e outro dupleto em $\delta_H$ 7,67 ($J$ =2,0 Hz), condizentes com os hidrogênios das posições H-5', H-2' e H-6', respectivamente (TAVAKOLI et al., 2022) (Figura 131, pág. 190).

Na região dos açúcares, foram observados três sinais de prótons anoméricos em $\delta_H$ 5,24 ($J$ =7,4 Hz), $\delta_H$ 4,52 ($J$ =1,5 Hz), e um dupleto em $\delta_H$ 5,11 ($J$ =7,5 Hz) (Figura 132, pág. 190), confirmando a presença de uma unidade *β*-D-glicopiranosídica comum a ambos os compostos e de uma unidade *α*-L-ramnopiranosil característica de uma rutina. Os prótons anoméricos de *β*-glicopiranosídeos apresentam constantes de acoplamento na faixa de 7-8 Hz, enquanto os prótons anoméricos da *α*-L-ramnose exibem constantes de acoplamento menores (1-2 Hz), frequentemente aparecendo como simpleto largo, em concordância com os dados observados (PHAM et al., 2022).

A presença da rutina na amostra foi inferida pelo sinal do grupo metila da ramnose em $\delta_H$ 1,12 ($J$ =6,2 Hz) (Figura 134, pág. 191). A porção *β*-glicose foi evidenciada por sinais de prótons oximetínicos na região de $\delta_H$ 3,24-3,81 ppm, bem como por um par de prótons oximetilênicos (-$CH_2$OH) em $\delta_H$ 3,72 e 3,58 ppm (Figura 133, pág. 191), compatíveis com a mistura de rutina e isoquercitrina (NAPOLITANO et al., 2012).

Ao analisar o espectro de RMN $^{13}C$ foi possível confirmar a proposta estrutural acima. Os sinais de carbono encontravam-se todos duplicados (Figura 135, pág. 192). Os sinais das carbonilas dos flavonois foram observados em $\delta_C$ 179,39 e 179,47 ppm típico do C-4 no anel C. Os sinais de C-2 e C-3 do núcleo da quercetina apareceram deslocados para campos mais baixos, em $\delta_C$ 159,32 e 135,60 ppm, respectivamente, para o primeiro flavonoide e $\delta_C$ 159,01 e 135,62 ppm para o segundo flavonoide, indicando a glicosilação no C-3 (PHOOPHA et al., 2020) (Figuras 136 e 137, págs. 192-193).

Sinais de carbonos também foram confirmados para o sistema ABX no anel B, com valores de $\delta_C$ 117,69, 116,04 e 123,56 ppm da molécula de rutina, enquanto os carbonos da isoquercitrina absorveram em $\delta_C$ 117,57, 115,99 e 123,19 ppm, referentes aos carbonos C-2', C-5' e C-6', respectivamente. Os carbonos oxigenados C-3' e C-4' absorveram em $\delta_C$ 145,81 e 149,79 para a molécula da rutina e em $\delta_C$ 145,88 e 149,83 ppm para a molécula de isoquercitrina (KULIĆ; STEINER; BUTTERER, 2025) (Figuras 137 e 138, pág. 193).

Os carbonos anoméricos da glicose e da ramnose típicos na rutina foram observados em $\delta_C$ 104,72 e $\delta_C$ 102,41 ppm, respectivamente, enquanto o carbono anomérico da glicose na molécula da isoquercitrina foi observado em $\delta_C$ 104,33 ppm (Figura 139, pág. 194), e os demais carbonos dos açúcares ressoaram entre $\delta_C$ 68,54 e 78,17 ppm (Figura 141, pág. 195). O carbono metílico da ramnose foi visualizado em $\delta_C$ 18,00 (ALMEIDA, 2017) (Figura 140, pág. 194). Com base no conjunto dos dados espectroscópicos de RMN $^1H$ e $^{13}C$, comparados com os dados da literatura (Tabela 29, pág. 187) a amostra foi caracterizada como sendo uma mistura de rutina (quercetina-3-*O*-[*α*-L-ramnopiranosil-(1→6)-*β*-D-glicopiranosídeo]) e isoquercitrina (quercetina-3-*O*-*β*-D-glicopiranosídeo) (QUEIROZ et al., 2015) (Figura 127 e 128, pág. 186).

Estes compostos foram isolados e descritos, pela primeira vez, na espécie *P. cancellata*, tendo sido anteriormente relatados em diversas outras espécies da família Malvaceae e no gênero *Pavonia*, como em *Bakeridesia pickelii* (COSTA et al., 2007); e *Pavonia xanthogloea* (MOSTARDEIRO et al., 2014).

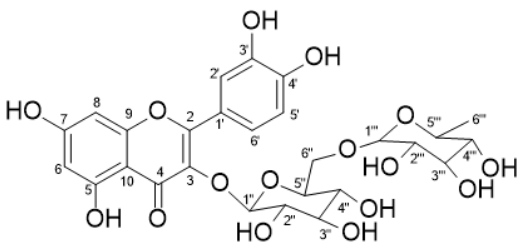


**Figura 127.** Rutina

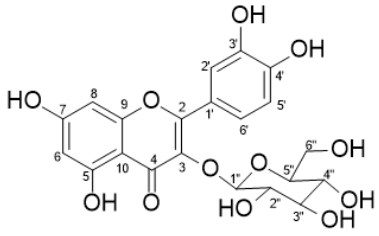


**Figura 128.** Isoquercitrina

**Tabela 29.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-14** (δ, $CD_3OD$, 500 e 125 MHz) com modelos da literatura ***Mo*-1** e ***Mo*-2** (δ, $CD_3OD$, 500 e 125 MHz) (KIM et al., 2017; WAN et al., 2012).

| C | ***Pc*-14a** | | ***Mo*-1** | | ***Pc*-14b** | | ***Mo*-2** | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** |
| **2** | - | 159,32 | - | 156,70 | - | 159,01 | - | 157,30 |
| **3** | - | 135,60 | - | 134,10 | - | 135,62 | - | 134,20 |
| **4** | - | 179,39 | - | 178,20 | - | 179,47 | - | 178,10 |
| **5** | - | 162,94 | - | 161,50 | - | 163,01 | - | 161,50 |
| **6** | 6,20 (d, *J* =2,1 Hz, 1H) | 99,93 | 6,11 (d, *J* =2,2 Hz, 1H) | 98,90 | 6,20 (d, *J* =2,0 Hz, 1H) | 99,87 | 6,20 (d, *J* =2,1 Hz, 1H) | 98,40 |
| **7** | - | 165,99 | - | 164,30 | - | 165,97 | - | 164,50 |
| **8** | 6,38 (d, *J* =2,2 Hz, 1H) | 94,86 | 6,40 (d, *J* =2,0 Hz, 1H) | 93,90 | 6,38 (d, *J* =2,2 Hz, 1H) | 94,71 | 6,40 (d, *J* =2,1 Hz, 1H) | 93,30 |
| **9** | - | 158,48 | - | 157,10 | - | 158,43 | - | 157,00 |
| **10** | - | 105,61 | - | 104,20 | - | 105,68 | - | 103,90 |
| **1'** | - | 123,11 | - | 121,90 | - | 123,06 | - | 121,60 |
| **2'** | 7,67 (d, *J* =2,0 Hz, 1H) | 117,69 | 7,55 (d, *J* =2,1 Hz, 1H) | 116,10 | 7,71 (d, *J* =1,8 Hz, 1H) | 117,57 | 7,71 (d, *J* =2,1 Hz, 1H) | 116,10 |
| **3'** | - | 145,81 | - | 145,60 | - | 145,88 | - | 144,40 |
| **4'** | - | 149,79 | - | 148,70 | - | 149,83 | - | 148,40 |
| **5'** | 6,87 (d, *J* =8,5 Hz, 1H) | 116,04 | 6,85 (d, *J* =8,4 Hz, 1H) | 116,50 | 6,87 (d, *J* =8,5 Hz, 1H) | 115,99 | 6,87 (d, *J* =8,5 Hz, 1H) | 114,60 |
| **6'** | 7,63 (dd, *J* =8,4; 2,0 Hz, 1H) | 123,56 | 7,56 (dd, *J* =9,0; 2,1 Hz, 1H) | 122,00 | 7,58 (dd, *J* =8,4; 1,9 Hz, 1H) | 123,19 | 7,60 (dd, *J* =8,5; 2,1 Hz, 1H) | 121,40 |
| **1''** | 5,11 (d, *J* =7,5 Hz, 1H) | 102,41 | 5,35 (d, *J* =7,8 Hz, 1H) | 101,40 | 5,24 (d, *J* =7,4 Hz, 1H) | 104,33 | 5,26 (d, *J* =7,8 Hz, 1H) | 102,80 |
| **2''** | 3,81-3,33 (m) | 73,93 | 3,83-3,35 (m) | 74,90 | 3,41 (m, 3H) | 75,72 | 3,55-3,40 (m, 3H) | 74,30 |
| **3''** | 3,81-3,33 (m) | 77,20 | 3,83-3,35 (m) | 76,70 | 3,41 (m, 3H) | 78,10 | 3,55-3,40 (m, 3H) | 76,70 |
| **4''** | 3,81-3,33 (m) | 72,23 | 3,83-3,35 (m) | 72,70 | 3,41 (m, 3H) | 71,20 | 3,55-3,40 (m, 3H) | 69,80 |

| | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| **5’’** | 3,81-3,33 (m) | 78,17 | 3,83-3,35 (m) | 76,70 | 3,24 (m, 1H) | 78,36 | 3,23 (m, 1H) | 77,00 |
| **6’’** | 3,81 (d, *J* =10,8 Hz, 1H); 3,52 (dd, *J* =10,5; 3,7 Hz, 1H) | 68,54 | 3,83-3,35 (m) | 67,30 | 3,72 (dd, *J* =11,9; 2,2 Hz, 1H); 3,58 (dd, *J* =11,8; 5,2 Hz, 1H) | 62,54 | 3,73 (dd, *J* =2,4; 11,9 Hz, 1H); 3,63 (dd, *J* =2,4; 11,9 Hz, 1H) | 61,10 |
| **1’’’** | 4,52 (d, *J* =1,5 Hz, 1H) | 104,73 | 5,12 (d, *J* =1,6 Hz, 1H) | 101,00 | - | | - | - |
| **2’’’** | 3,81-3,33 (m) | 69,70 | 3,83-3,35 (m) | 70,80 | - | | - | - |
| **3’’’** | 3,81-3,33 (m) | 71,38 | 3,83-3,35 (m) | 71,20 | - | | - | - |
| **4’’’** | 3,81-3,33 (m) | 72,09 | 3,83-3,35 (m) | 71,40 | - | | - | - |
| **5’’’** | 3,81-3,33 (m) | 69,70 | 3,83-3,35 (m) | 68,50 | - | | - | - |
| **6’’’** | 1,12 (d, *J* =6,2 Hz, 3H) | 17,87 | 1,13 (d, *J* =6,2 Hz, 3H) | 18,00 | - | | - | - |
| **5-OH** | 12,33 | - | - | - | 12,35 | - | - | - |

**Figura 129.** Espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-14 (δ, $CD_3OD$, 500 MHz).

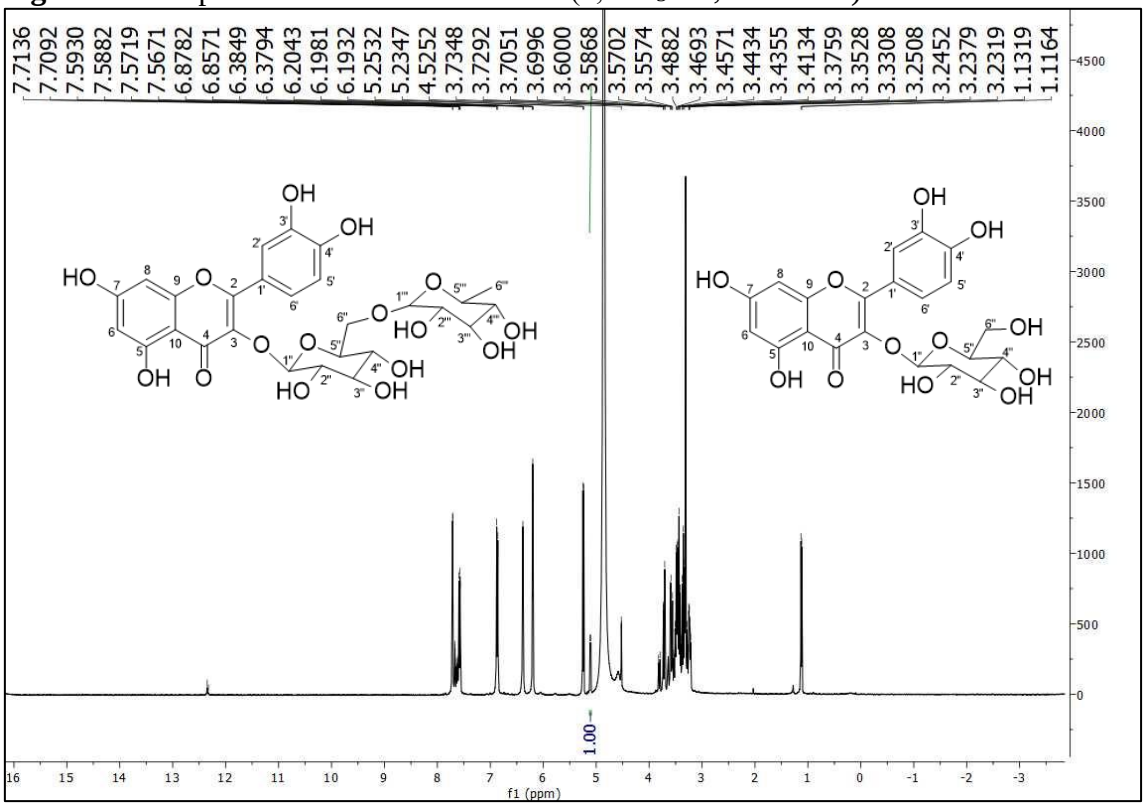



**Figura 130.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-14 (δ, $CD_3OD$, 500 MHz).

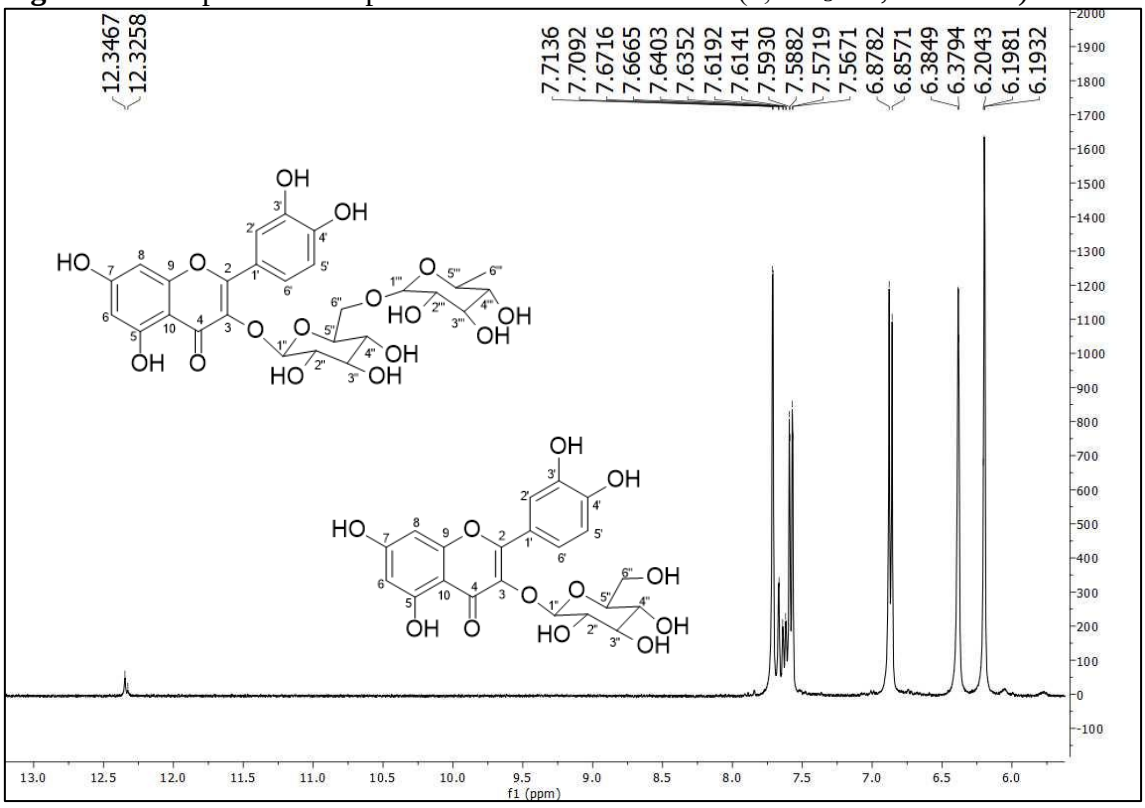


**Figura 131.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-14 (δ, $CD_3OD$, 500 MHz).

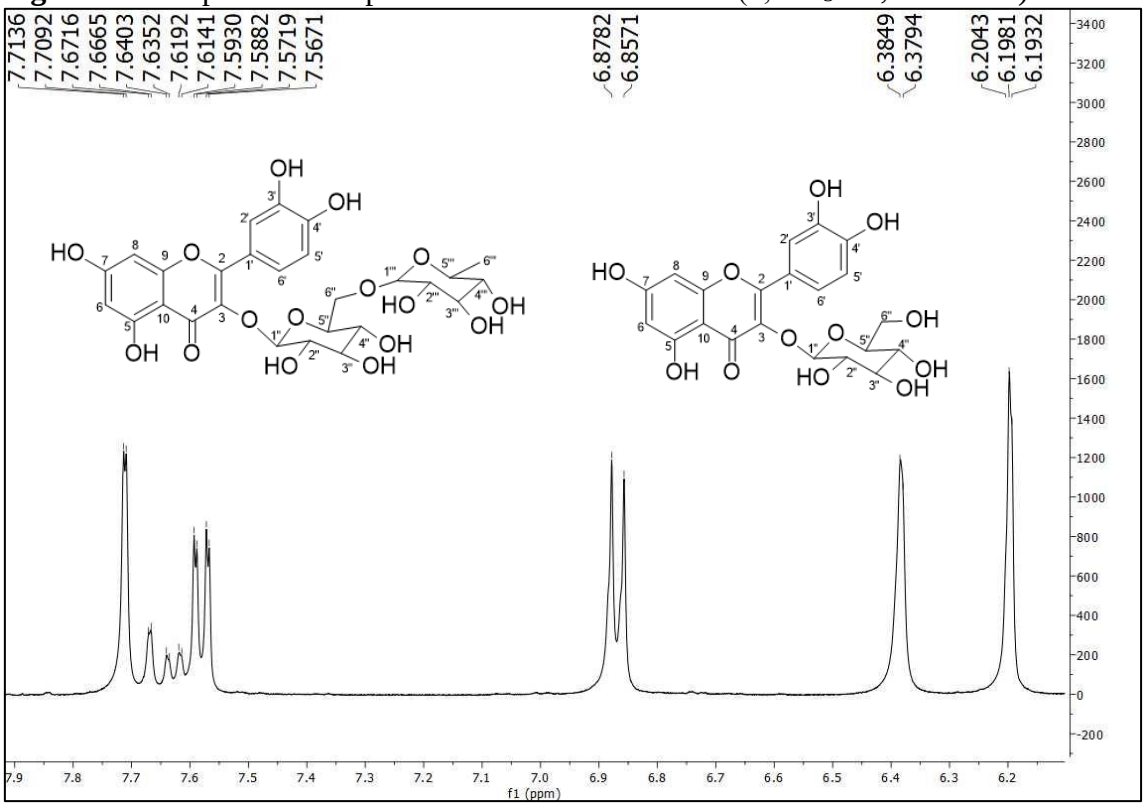



**Figura 132.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-14 (δ, $CD_3OD$, 500 MHz).

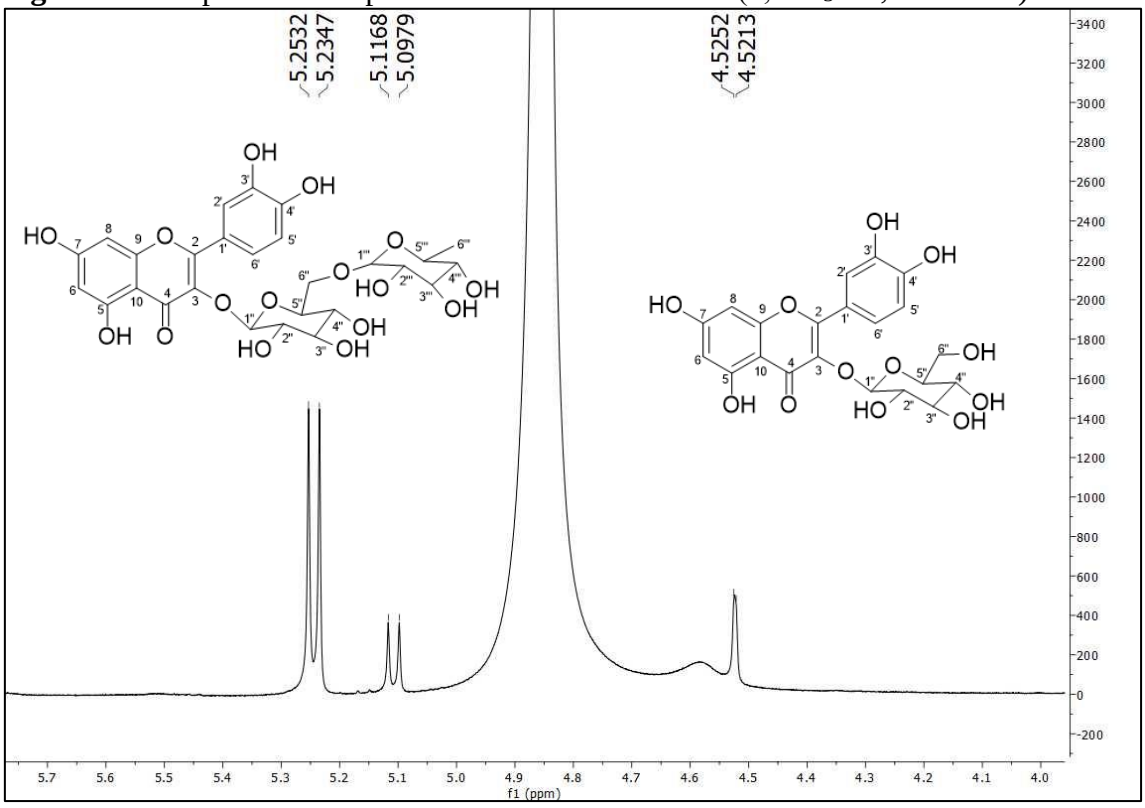


**Figura 133.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-14 (δ, $CD_3OD$, 500 MHz).

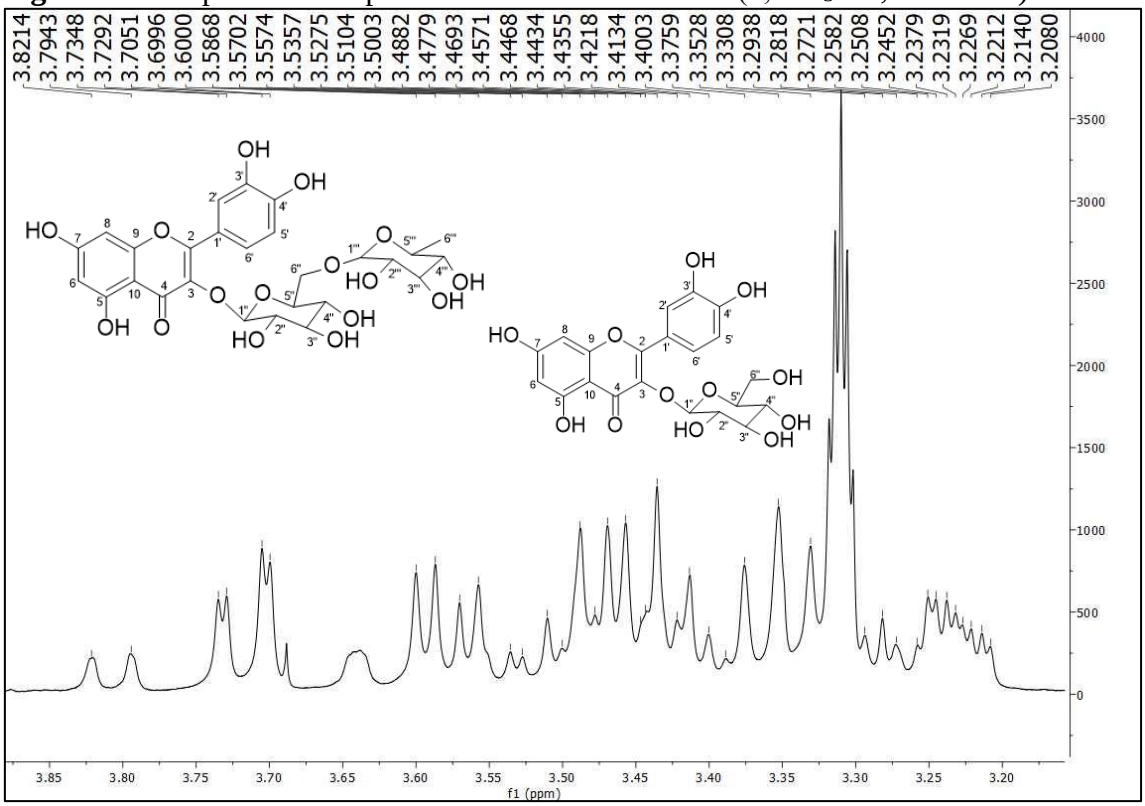



**Figura 134.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-14 (δ, $CD_3OD$, 500 MHz).

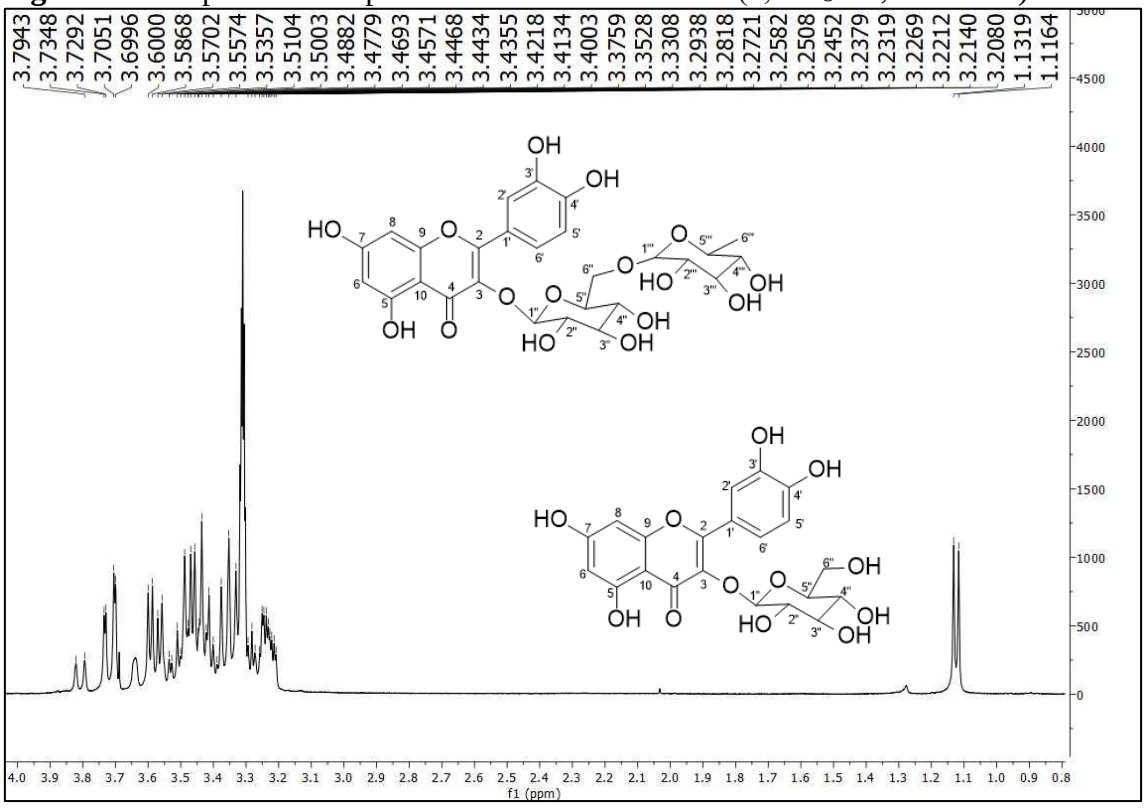


**Figura 135.** Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-14 (δ, $CD_3OD$, 125 MHz).

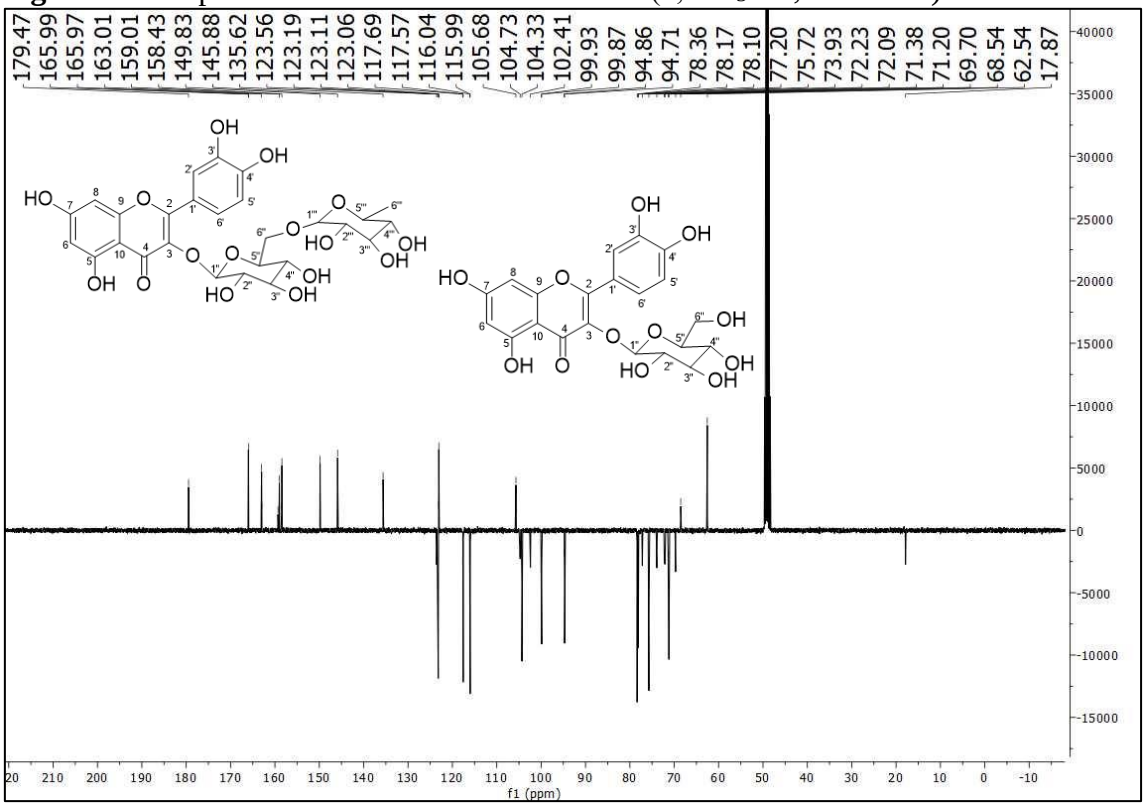



**Figura 136.** Expansão do espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-14 (δ, $CD_3OD$, 125 MHz).

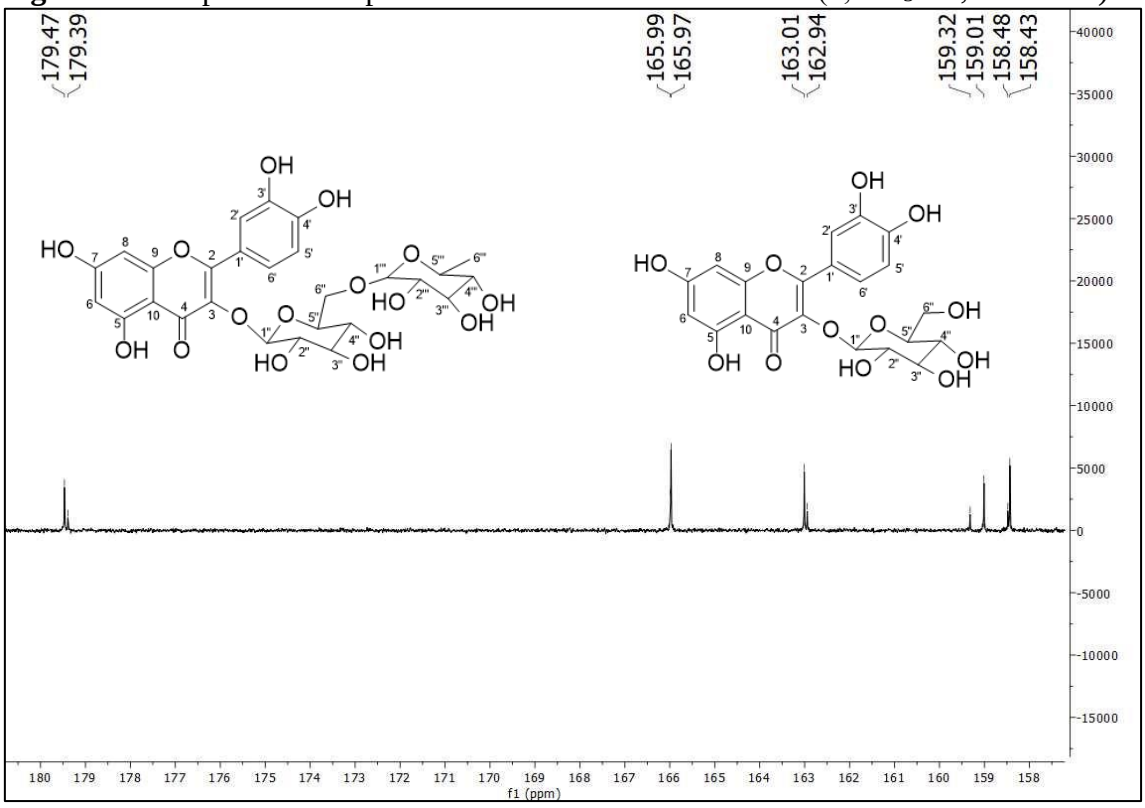


**Figura 137.** Expansão do espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-14 (δ, $CD_3OD$, 125 MHz).

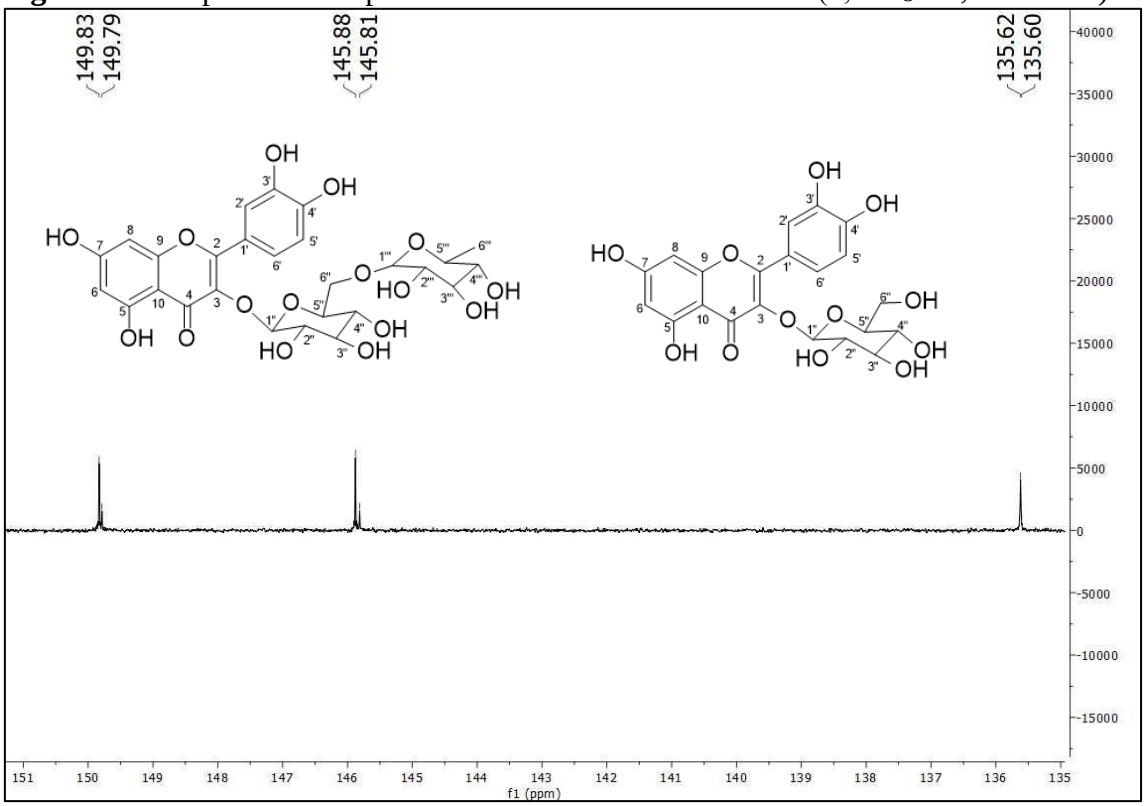



**Figura 138.** Expansão do espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-14 (δ, $CD_3OD$, 125 MHz).

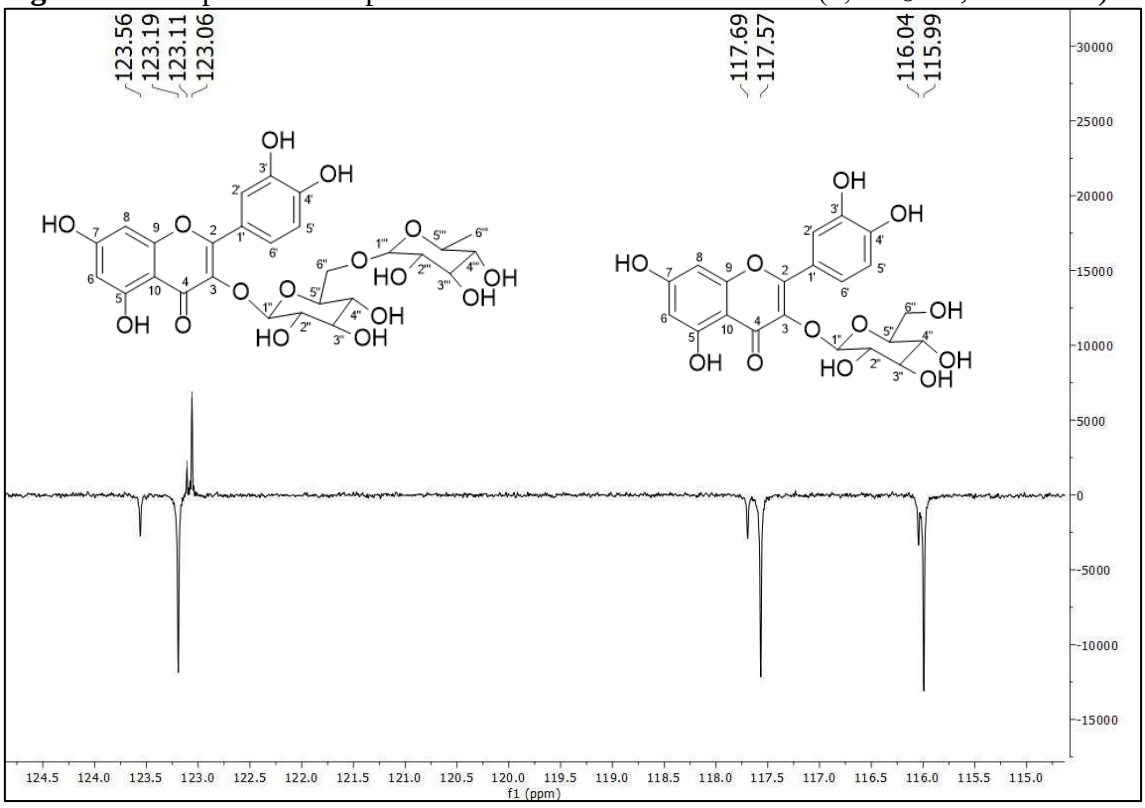


**Figura 139.** Expansão do espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-14 (δ, $CD_3OD$, 125 MHz).

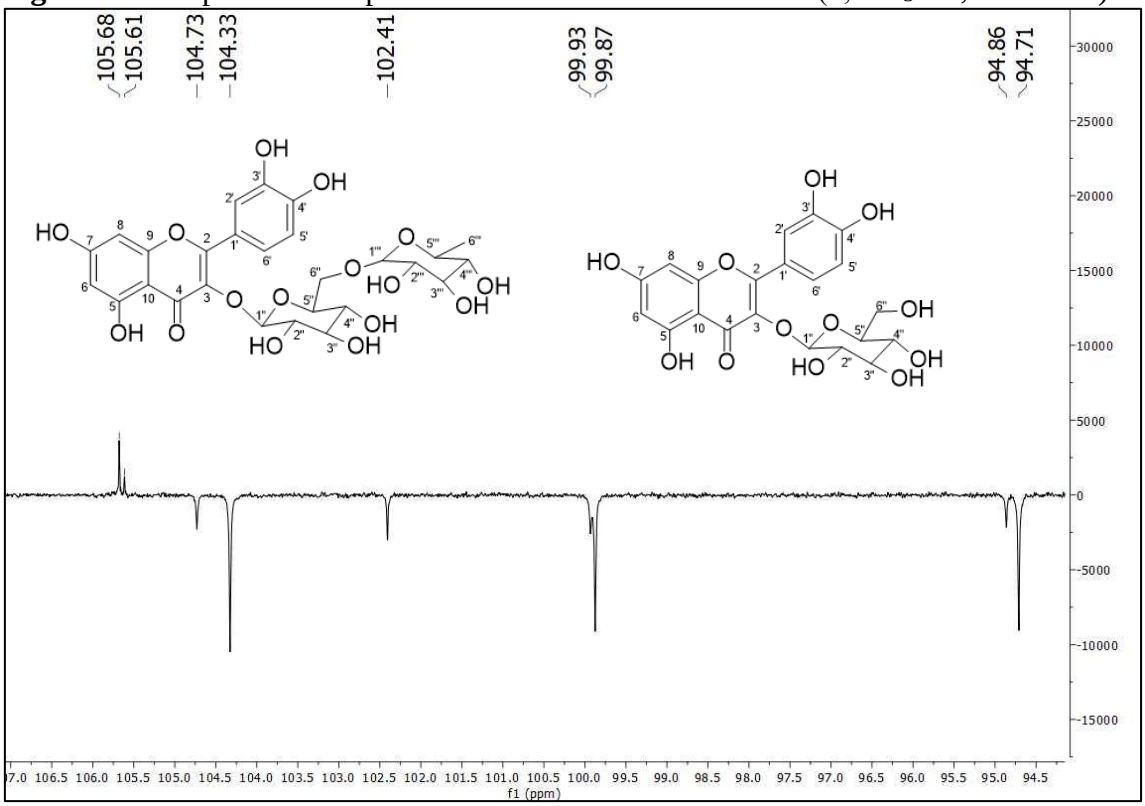



**Figura 140.** Expansão do espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-14 (δ, $CD_3OD$, 125 MHz).

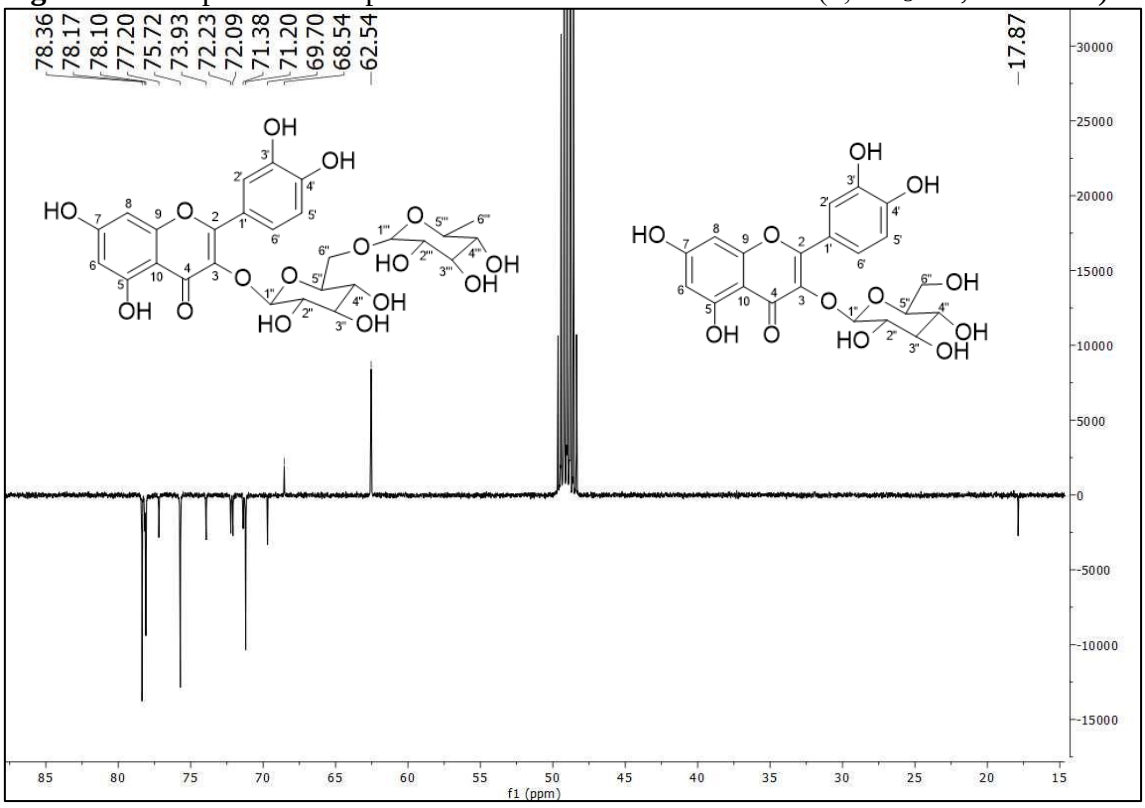
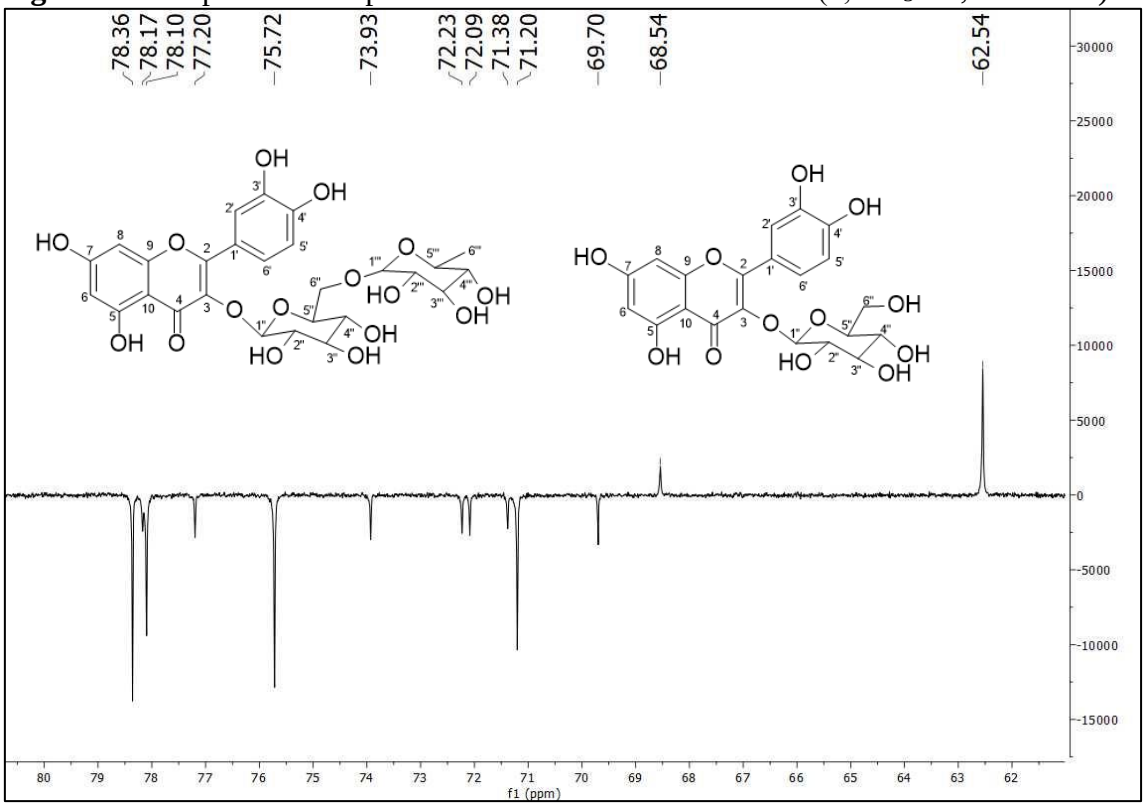


**Figura 141.** Expansão do espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pc*-14 (δ, $CD_3OD$, 125 MHz).




### 5.4.15 Determinação estrutural de *Pc*-15

A substância *Pc*-15 foi obtida na forma de um pó amarelado. Em seu cromatograma apresenta-se como o terceiro pico com tempo de retenção de 36,968 minutos (Figura 121, pág. 180). Ao analisar o seu espectro de RMN de $^1$H, obtido em DMSO-$d_6$, foram evidenciados sinais característicos de núcleo flavonol e da unidade dissacarídica (Figura 143, pág. 199). Observaram-se dois dupletos acoplando em meta com constantes de acoplamento de $\delta_H$ 6,18 ($J$ =2,0 Hz) e $\delta_H$ 6,40 ($J$ =2,0 Hz), condizentes aos hidrogênios aromáticos ligados aos carbonos C-6 e C-8, respectivamente, do anel A de flavonoides (CHAVES et al., 2017) (Figura 144, pág. 200).

Dois dupletos foram exibidos com sinais em $\delta_H$ 7,97 ($J$ =8,9 Hz) e $\delta_H$ 6,87 (dd, $J$ =8,9 Hz), referentes aos hidrogênios ligados aos carbonos C-2'/C-6' e C-3'/C-5', respectivamente típicos de um sistema AA′BB′ do anel B, semelhante à substância codificada como *Pc*-11 (OSW & HUSSAIN, 2020) (Figura 144, pág. 200). Na região dos açúcares, o próton anomérico da unidade osídica foi observado em $\delta_H$ 5,30 ($J$ =7,4 Hz) indicando configuração *β*, enquanto o próton anomérico da ramnose apareceu como um dupleto em $\delta_H$ 4,37 ($J$ =1,2 Hz), compatível com configuração *α* (YANG et al., 2013). Os demais prótons dos açúcares foram observados como múltiplos sinais entre δ 3,03 e 3,82

ppm. O grupo metila da ramnose foi atribuído ao dupleto em $\delta_H$ 0,97 ($J$ =6,2 Hz) (Figura 143, pág. 199).

Ao analisar os espectros de RMN $^{13}$C-BB e DEPT-135, pôde-se observar um sinal da carbonila característica do flavonol em $\delta_C$ 177,82, correspondente ao C-4 do anel C de flavonoides. Carbonos oxigenados do anel A do núcleo flavonoídico apareceram entre $\delta_C$ 161,63 e $\delta_C$ 164,76 ppm referentes aos carbonos C-5 e C-7, respectivamente (FERREIRA et al., 2019). O sinal em $\delta_C$ 133,65 foi atribuído ao carbono C-3, evidenciando uma substituição nessa posição. Os carbonos aromáticos do anel B foram detectados em $\delta_C$ 131,34 e 115,56 ppm condizentes aos carbonos C-2′/C-6′) e C-3'/C-5', respectivamente (LEAL et al., 2019) (Figura 145, pág. 200). Os carbonos anoméricos da glicose e da ramnose foram observados em $\delta_C$ 101,78 (C-1'') e $\delta_C$ 101,21 (C-1'''). Os demais carbonos dos açúcares apareceram na faixa entre $\delta_C$ 66,44 a 76,80 ppm, enquanto o carbono metílico da ramnose foi evidenciado em $\delta_C$ 18,15 ppm (OSW & HUSSAIN, 2020) (Figuras 145 e 146, págs. 200-201).

No espectro de HSQC, observam-se correlações diretas entre prótons e carbonos ligados, permitindo a atribuição dos sinais de carbonos do núcleo flavonoídico, juntamente com prótons e carbonos de unidades osídicas (glicose e ramnose) (Figuras 147 e 148, págs. 201-202). No espectro de HMBC foram vistas correlações entre o próton de C-1'' $\delta_H$ 5,30 ($J$ =7,4 Hz) e três ligações com o carbono da posição C-3 do núcleo flavonoídico, indicando a substituição nesta posição e o próton de C-1''' $\delta_H$ 4,37 ($J$ =1,2 Hz) à 2 ligações com o C-2''' e três ligações com o carbono da posição C-5'''. O próton metílico C-6''' em $\delta_H$ 0,97 ($J$ =6,2 Hz) referente à metila terminal de ramnose está à 3 ligações com o carbono C-4''' e à 2 ligações com o carbono C-5''' (Figuras 149 e 150, págs. 202-203).

O conjunto de dados de RMN $^1$H e $^{13}$C (Tabela 30, pág. 197) juntamente com os dados de HSQC e HMBC (Tabela 31, pág. 198) confirmou a unidade *α-L*-ramnopiranosil-(1→6)-*β-D*-glicopiranose ligada ao C-3 do flavonol canferol, confirmando a identidade do composto como sendo o canferol-3-*O*-rutinosídeo (Figura 142, pág. 196), substância isolada pela primeira vez no gênero *Pavonia* e na espécie em estudo.

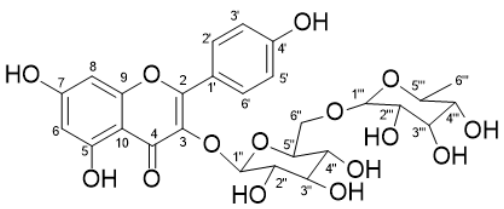



**Figura 142.** Canferol-3-*O*-rutinosídeo

**Tabela 30.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-15** (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz) com modelo da literatura ***Mo*-1** (δ, DMSO-$d_6$, 300 e 125 MHz) (OSW & HUSSAIN, 2020).

| C | ***Pc*-15** | | | ***Mo*-1** | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$ - BB** | **$\delta_C$ - DEPT-135** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$ - BB** | **$\delta_C$ - DEPT-135** |
| **2** | - | 156,97 | - | - | 156,49 | - |
| **3** | - | 133,65 | - | - | 133,20 | - |
| **4** | - | 177,82 | - | - | 177,34 | - |
| **5** | - | 161,63 | - | - | 161,17 | - |
| **6** | 6,19 (d, *J* =1,8 Hz, 1H) | 99,22 | 99,24 | 6,20 (d, *J* =1,8 Hz, 1H) | 98,76 | 98,80 |
| **7** | - | 164,76 | - | - | 164,34 | - |
| **8** | 6,41 (d, *J* =1,8 Hz, 1H) | 94,25 | 94,25 | 6,40 (d, *J* =1,8 Hz, 1H) | 93,76 | 93,80 |
| **9** | - | 157,31 | - | - | 156,80 | - |
| **10** | - | 104,38 | - | - | 103,90 | - |
| **1'** | - | 121,34 | - | - | 120,86 | - |
| **2'** | 7,97 (d, *J* =8,9 Hz, 2H) | 131,34 | 131,34 | 8,00 (d, *J* =8,8 Hz, 2H) | 130,85 | 130,80 |
| **3'** | 6,87 (dd, *J* =9,2; 2,3 Hz, 2H) | 115,56 | 115,57 | 6,88 (d, *J* =8,8 Hz, 2H) | 115,08 | 115,10 |
| **4'** | - | 160,34 | - | - | 159,91 | - |
| **5'** | 6,87 (dd, *J* =9,2; 2,3 Hz, 2H) | 115,56 | 115,57 | 6,88 (d, *J* =8,8 Hz, 2H) | 115,08 | 115,10 |
| **6'** | 7,97 (d, *J* =8,9 Hz, 2H) | 131,34 | 131,34 | 8,00 (d, *J* =8,8 Hz, 2H) | 130,85 | 130,80 |
| **1''** | 5,30 (d, *J* =7,4 Hz, 1H) | 101,78 | 101,78 | 5,30 (d, *J* =7,3 Hz, 1H) | 101,35 | 101,30 |
| **2''** | 3,18 (m, 1H) | 74,62 | 74,62 | 3,16 (m, 1H) | 74,16 | 74,20 |
| **3''** | 3,21 (m, 1H) | 76,80 | 76,80 | 3,21 (m, 1H) | 76,36 | 76,40 |
| **4''** | 3,04 (m, 1H) | 70,37 | 70,38 | 3,05 (m, 1H) | 69,89 | 69,90 |
| **5''** | 3,26 (m, 2H) | 76,17 | 76,17 | 3,24 (m, 2H) | 75,73 | 75,70 |
| **6''** | 3,68 (d, *J* =9,6 Hz, 1H) | 66,44 | 67,35 | 3,70 (sl, *J* =10,0 Hz, 1H); 3,30 (sl, *J* =10,0 Hz, 1H) | 66,87 | 66,90 |
| **1'''** | 4,37 (d, *J* =1,2 Hz, 1H) | 101,21 | 101,21 | 4,37 (sl, 1H) | 100,76 | 100,80 |
| **2'''** | 3,26 (m, 2H) | 70,79 | 70,79 | 3,24 (m, 2H) | 70,33 | 70,30 |
| **3'''** | - | 71,04 | 71,04 | 3,68 (m, 2H) | 7058 | 70,60 |

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| **4’’’** | 3,08 (m, 1H) | 72,26 | 72,26 | 3,10 (m, 1H) | 71,81 | 71,80 |
| **5’’’** | - | 68,70 | 68,70 | 3,68 (m, 2H) | 68,23 | 68,20 |
| **6’’’** | 0,97 (d, *J* =6,2 Hz, 3H) | 18,15 | 18,15 | 0,98 (d, *J* =6,1 Hz, 3H) | 17,71 | 17,70 |

**Tabela 31.** Dados espectrais de HSQC e HMBC de ***Pc*-15** (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).

| **C** | **HSQC** | | **HMBC** | |
|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$^2J$** | **$^3J$** |
| **2** | - | 156,97 | - | - |
| **3** | - | 133,65 | - | - |
| **4** | - | 177,82 | - | - |
| **5** | - | 161,63 | - | - |
| **6** | 6,19 (d, *J* =1,8 Hz, 1H) | 99,22 | C-5; C-7 | C-8; C-10 |
| **7** | - | 164,76 | - | - |
| **8** | 6,41 (d, *J* =1,8 Hz, 1H) | 94,25 | C-9; C-7 | C-6; C-10 |
| **9** | - | 157,31 | - | - |
| **10** | - | 104,38 | - | - |
| **1’** | - | 121,34 | - | - |
| **2’** | 7,97 (d, *J* =8,9 Hz, 2H) | 131,34 | - | C-2; C4’; C-6’ |
| **3’** | 6,87 (dd, *J* =9,2; 2,3 Hz, 2H) | 115,56 | C-4’ | C-1’; C-5’ |
| **4’** | - | 160,34 | - | - |
| **5’** | 6,87 (dd, *J* =9,2; 2,3 Hz, 2H) | 115,56 | C-4’ | C-1’; C-3’ |
| **6’** | 7,97 (d, *J* =8,9 Hz, 2H) | 131,34 | - | C-2; C-2’; C-4’ |
| **1’’** | 5,30 (d, *J* =7,4 Hz, 1H) | 101,78 | - | C-3 |
| **2’’** | 3,18 (m, 1H) | 74,62 | - | - |
| **3’’** | 3,21 (m, 1H) | 76,80 | - | - |
| **4’’** | 3,04 (m, 1H) | 70,37 | - | - |
| **5’’** | 3,26 (m, 2H) | 76,17 | - | - |
| **6’’** | 3,68 (d, *J* =9,6 Hz, 1H) | 66,44 | - | - |
| **1’’’** | 4,37 (d, *J* =1,2 Hz, 1H) | 101,21 | C-2’’’ | C-5’’’ |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| **2’’’** | 3,26 (m, 2H) | 70,79 | - | - |
| **3’’’** | - | 71,04 | - | - |
| **4’’’** | 3,08 (m, 1H) | 72,26 | - | - |
| **5’’’** | - | 68,70 | - | - |
| **6’’’** | 0,97 (d, *J* =6,2 Hz, 3H) | 18,15 | C-5’’’ | C-4’’’ |

**Figura 143.** Espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-15 (δ, DMSO-$d_6$, 400 MHz).

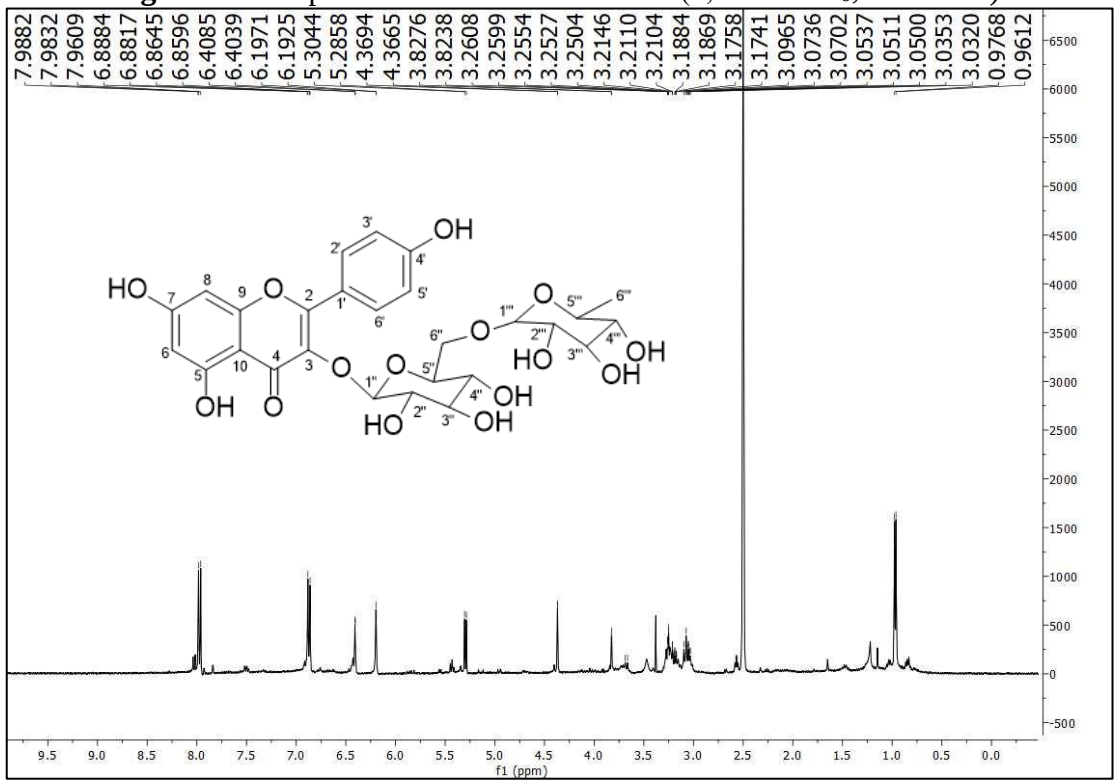


**Figura 144.** Expansão do espectro de RMN $^{1}$H de *Pc*-15 (δ, DMSO-$d_6$, 400 MHz).

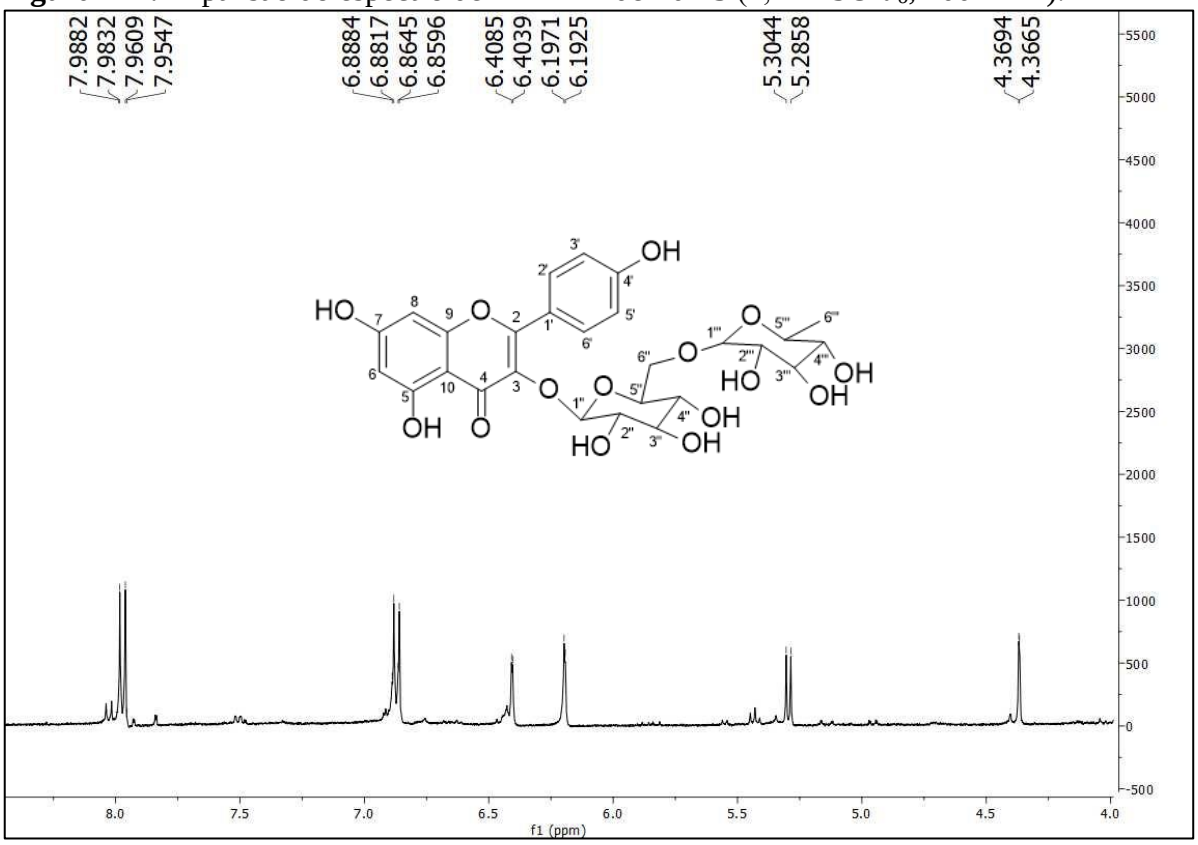



**Figura 145.** Espectro de RMN $^{13}$C-BB de *Pc*-15 (δ, DMSO-$d_6$, 100 MHz).

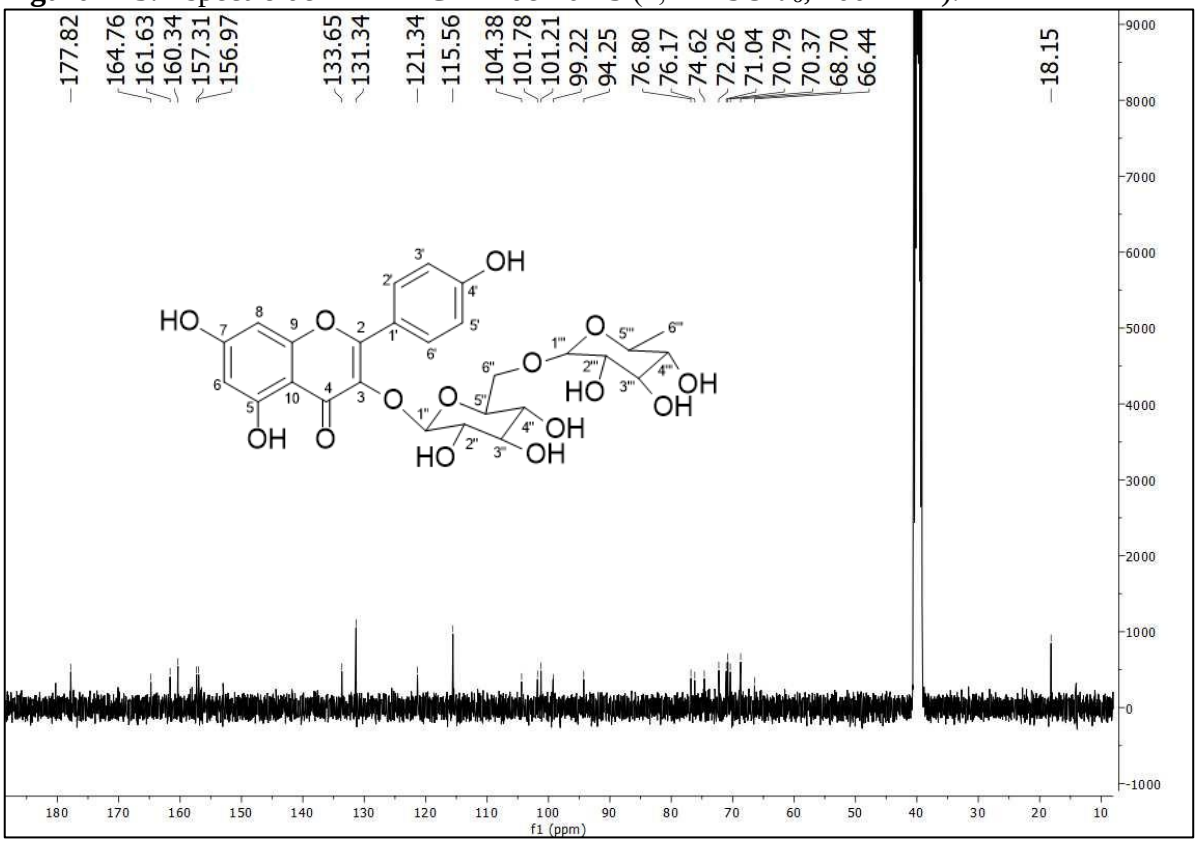


**Figura 146.** Espectro de RMN $^{13}$C-DEPT-135 de *Pc*-15 (δ, DMSO-$d_6$, 100 MHz).

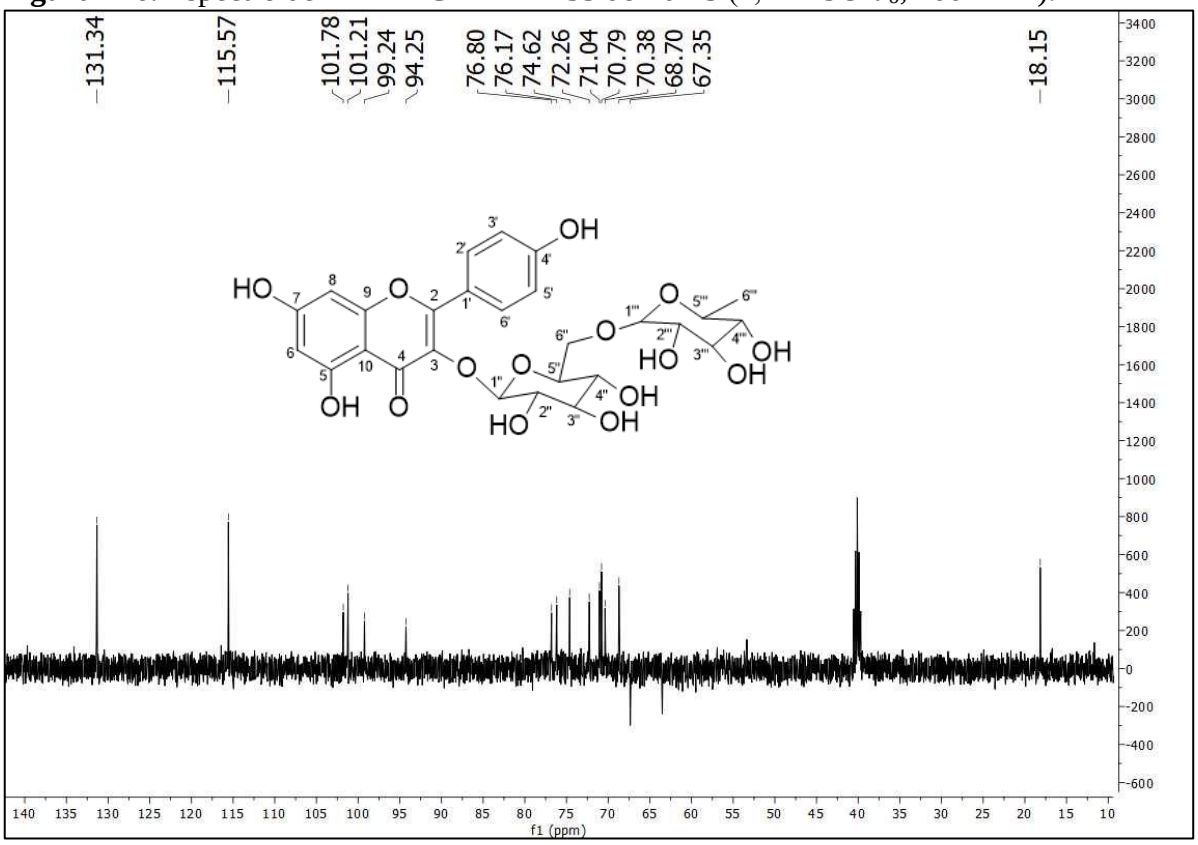



**Figura 147.** Espectro de RMN $^{1}$H/$^{13}$C-HSQC de *Pc*-15 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).

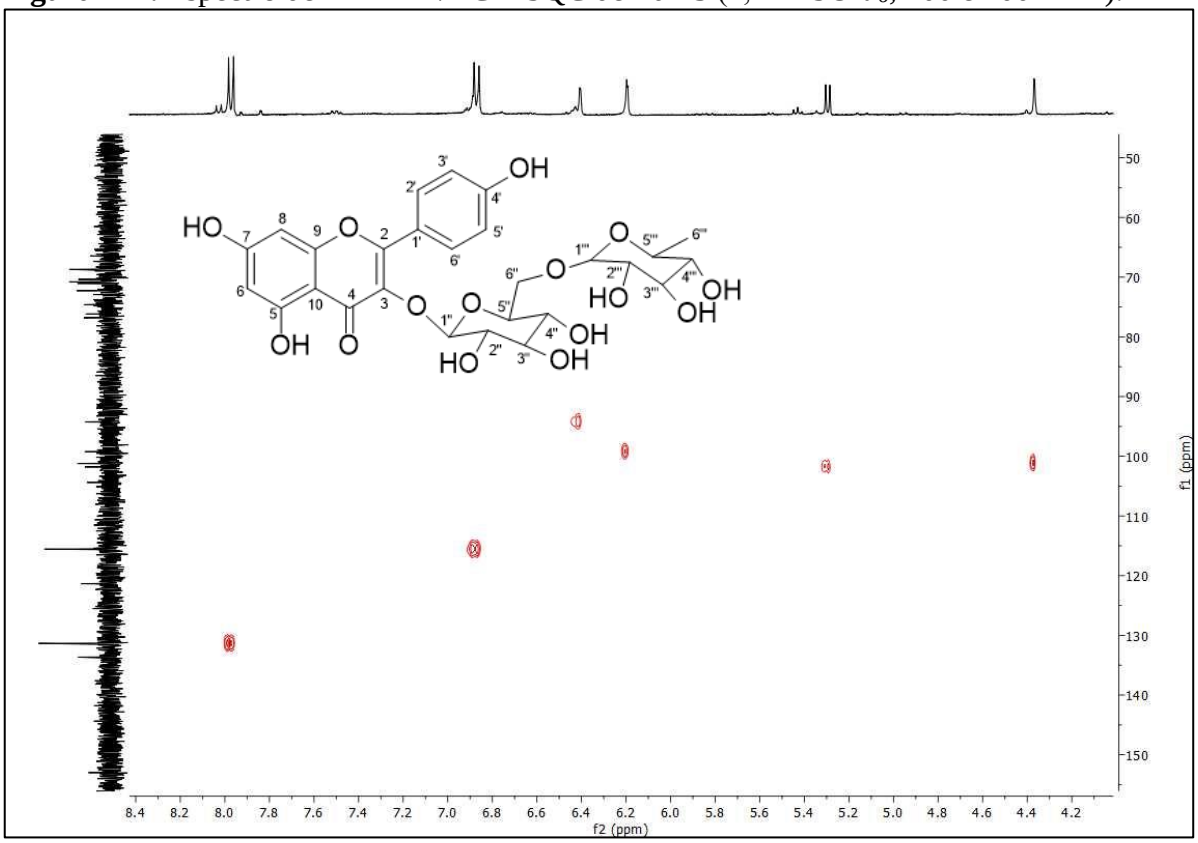


**Figura 148.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HSQC de *Pc*-15 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).

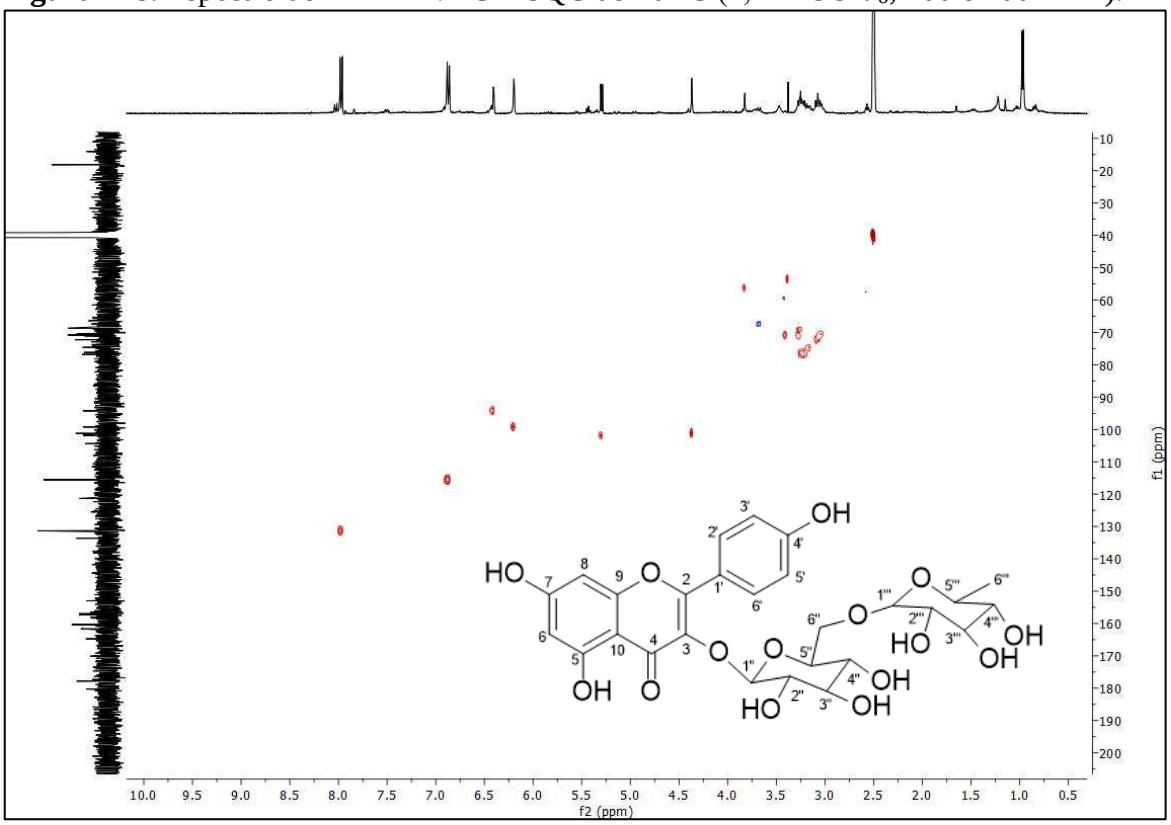



**Figura 149.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HMBC de *Pc*-15 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).

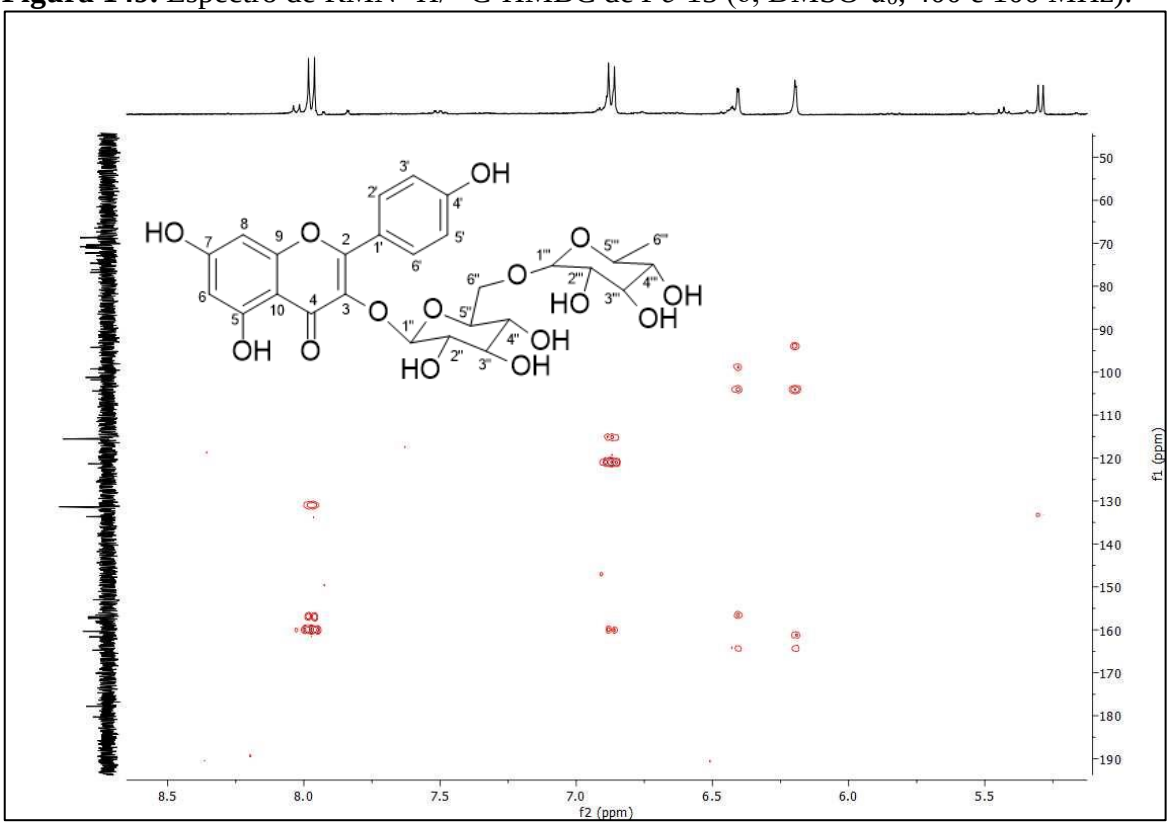
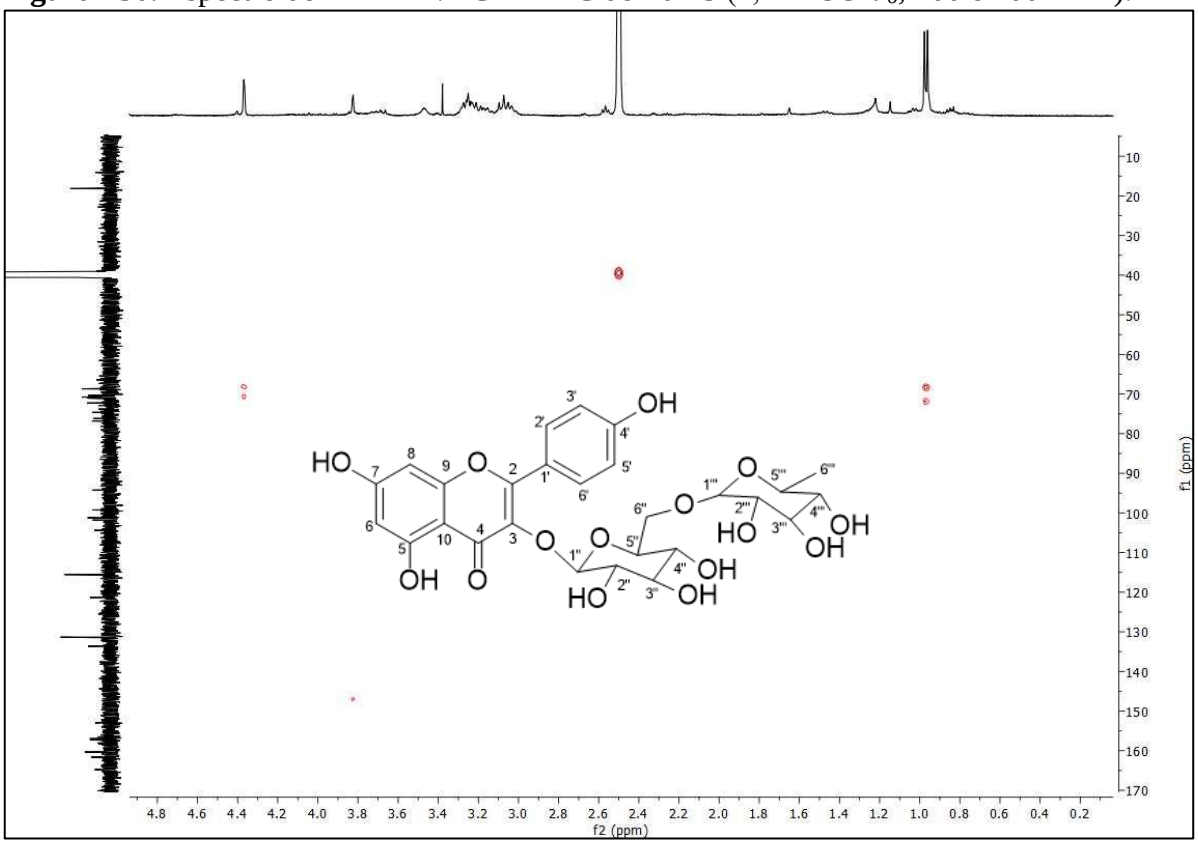


**Figura 150.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HMBC de *Pc*-15 (δ, DMSO-$d_6$, 400 e 100 MHz).




### 5.4.16 Determinação estrutural de *Pc*-16

A substância *Pc*-16 foi obtida na forma de um pó branco. Em seu cromatograma apresenta-se como o quarto pico com tempo de retenção de 43,646 minutos (Figura 121, pág. 180). A análise do espectro de RMN $^{1}H$ (Figura 152, pág. 206) revelou sinais característicos de hidrogênios aromáticos, compatíveis com um anel benzênico trissubstituído. Foram observados um dupleto em $\delta_H$ 6,80 ($J$ =8,0 Hz), atribuído ao hidrogênio H-5, um dupleto em $\delta_H$ 7,41 ($J$ =1,9 Hz), correspondente ao hidrogênio H-6, e um dupleto em $\delta_H$ 7,44 ($J$ =2,2 Hz), atribuído ao hidrogênio H-2 (MACHADO et al., 2016) (Figura 152, pág. 206).

A partir disso, previu-se a existência de um anel benzênico trissubstituído nos carbonos C1, C3 e C4 (JEONG et al., 2023). O padrão de acoplamento observado, incluindo acoplamentos orto e meta, é típico de derivados do ácido benzoico substituídos nas posições C3 e C4, que condiz com a estrutura do ácido protocatecuico (3,4-dihidroxibenzoico) (LEE et al., 2011).

No espectro de RMN $^{13}C$ (Figura 153, pág. 206) da substância *Pc*-14, observaram-se sete sinais de carbono, distribuídos entre $\delta_C$ 115,76 e 170,27 ppm, número compatível com a fórmula estrutural proposta. Os sinais mais desblindados, observados em $\delta_C$ 146,02 e 151,46,

foram atribuídos aos carbonos oxigenados C-3 e C-4, ligados a grupos hidroxila fenólicos, enquanto o sinal em $\delta_C$ 170,27 foi atribuído ao carbono da carbonila do grupo ácido carboxílico (C-7). Os demais sinais, localizados na região típica de carbonos aromáticos hidrogenados, corroboram a presença de um núcleo benzênico substituído (TEETHAISONG et al., 2025) (Figura 153, pág. 206).

A análise do espectro bidimensional de HSQC (Figura 154, pág. 207) permitiu estabelecer correlações diretas entre hidrogênios e seus respectivos carbonos ligados, confirmando as atribuições obtidas a partir dos espectros unidimensionais. Adicionalmente, foram observadas correlações de longo alcance por meio da análise do espectro bidimensional de HMBC, destacando-se a correlação em meta entre o hidrogênio H-2 e o carbono C-6, e dos hidrogênios H-2 e H-6 e o carbono carbonílico (C-7) a três ligações, conforme descrito anteriormente para o ácido protocatecuico e compostos estruturalmente relacionados (Figura 155, pág. 207; Tabela 33, pág. 205).

Dessa forma, a análise conjunta dos dados de RMN de $^{1}H$, $^{13}C$ (Tabela 32, pág. 205) e dos espectros bidimensionais forneceu subsídios consistentes para a identificação do composto *Pc*-14 como sendo o ácido protocatecuico (Figura 151, pág. 204), um ácido fenólico amplamente relatado em matrizes vegetais e reconhecido por suas propriedades biológicas, incluindo atividades antioxidante, antimicrobiana, inseticida, anti-inflamatória, anti-hiperglicêmicas, anticancerígenas, antitumorais, antiúlceras, antiespasmódicas, dentre outras (KHAN et al., 2015).

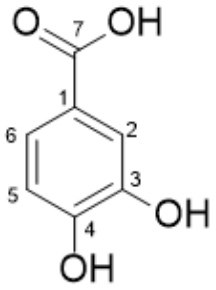



**Figura 151.** Ácido Protocatecuico.

**Tabela 32.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-16** (δ, $CD_3OD$, 500 e 125 MHz) com modelo da literatura ***Mo*-1** (δ, $CD_3OD$, 500 e 125 MHz) (LEE et al., 2011).

| **C** | ***Pc*-16** | | ***Mo*-1** | |
|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** |
| **1** | - | 123,27 | - | 123,40 |
| **2** | 7,44 (d, *J* =2,2 Hz, 1H) | 117,75 | 7,43 (sl, 1H) | 117,90 |
| **3** | - | 146,02 | - | 146,20 |
| **4** | - | 151,46 | - | 151,70 |
| **5** | 6,80 (d, *J* =8,0 Hz, 1H) | 115,76 | 6.79 (d, *J* =8,0 Hz, 1H); | 115,90 |
| **6** | 7,41 (d, *J* =1,9 Hz, 1H) | 123,88 | 7,42 (dd, *J* =2,0; 8,0 Hz, 1H) | 124,00 |
| **7 (C=O)** | - | 170,27 | - | 170,40 |

**Tabela 33**. Dados comparativos de HSQC e HMBC (δ, $CD_3OD$, 500 e 125 MHz) de ***Pc*-16**.

| **C** | **HSQC** | | **HMBC** | |
|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$^{2}J$** | **$^{3}J$** |
| **1** | - | 123,27 | - | - |
| **2** | 7,44 (d, *J* =2,2 Hz, 1H) | 117,75 | C-3 | C-4; C-6; C-7 |
| **3** | - | 146,02 | - | - |
| **4** | - | 151,46 | - | - |
| **5** | 6,80 (d, *J* =8,0 Hz, 1H) | 115,76 | C-4 | C-1; C-3 |
| **6** | 7,41 (d, *J* =1,9 Hz, 1H) | 123,88 | - | C-2; C-6; C-7 |
| **7 (C=O)** | - | 170,27 | - | - |

**Figura 152.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-16 (δ, $CD_3OD$, 500 MHz).

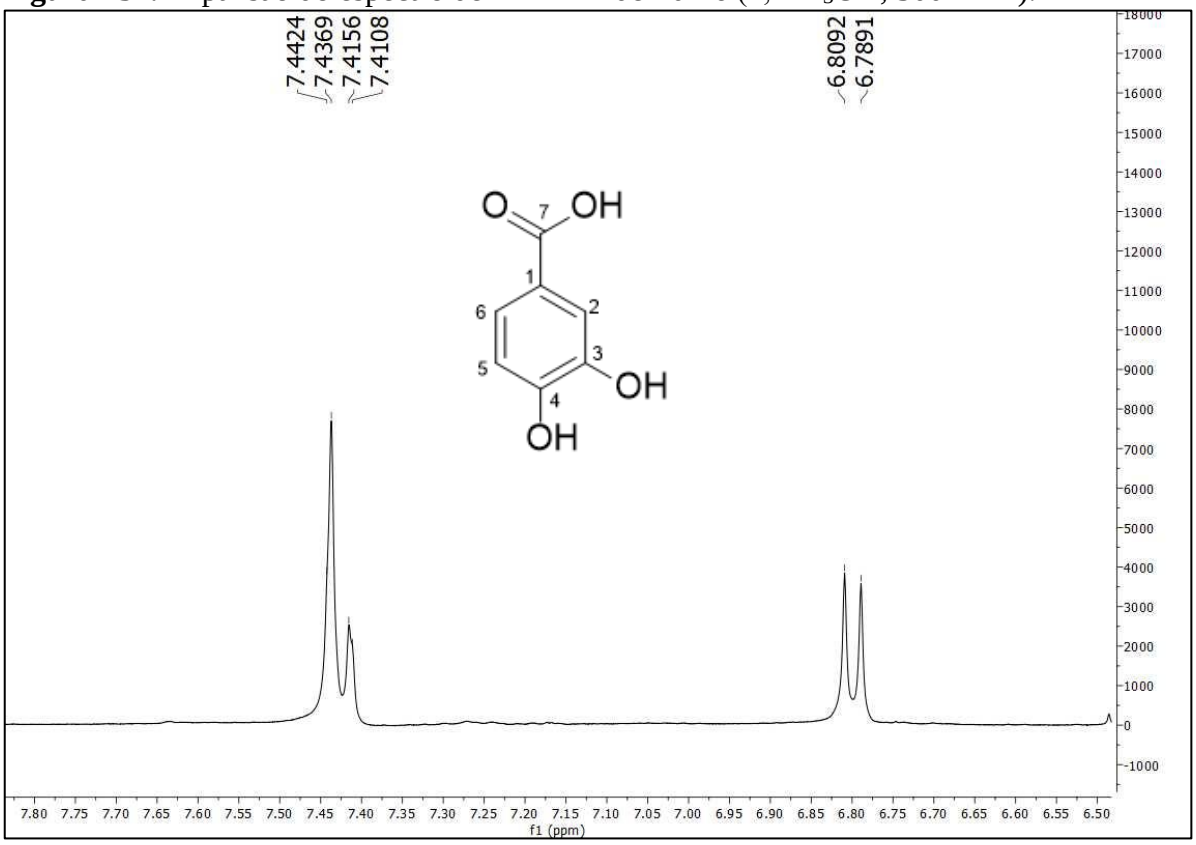



**Figura 153.** Espectro de RMN $^{13}C$-APT de *Pc*-16 (δ, $CD_3OD$, 125 MHz).

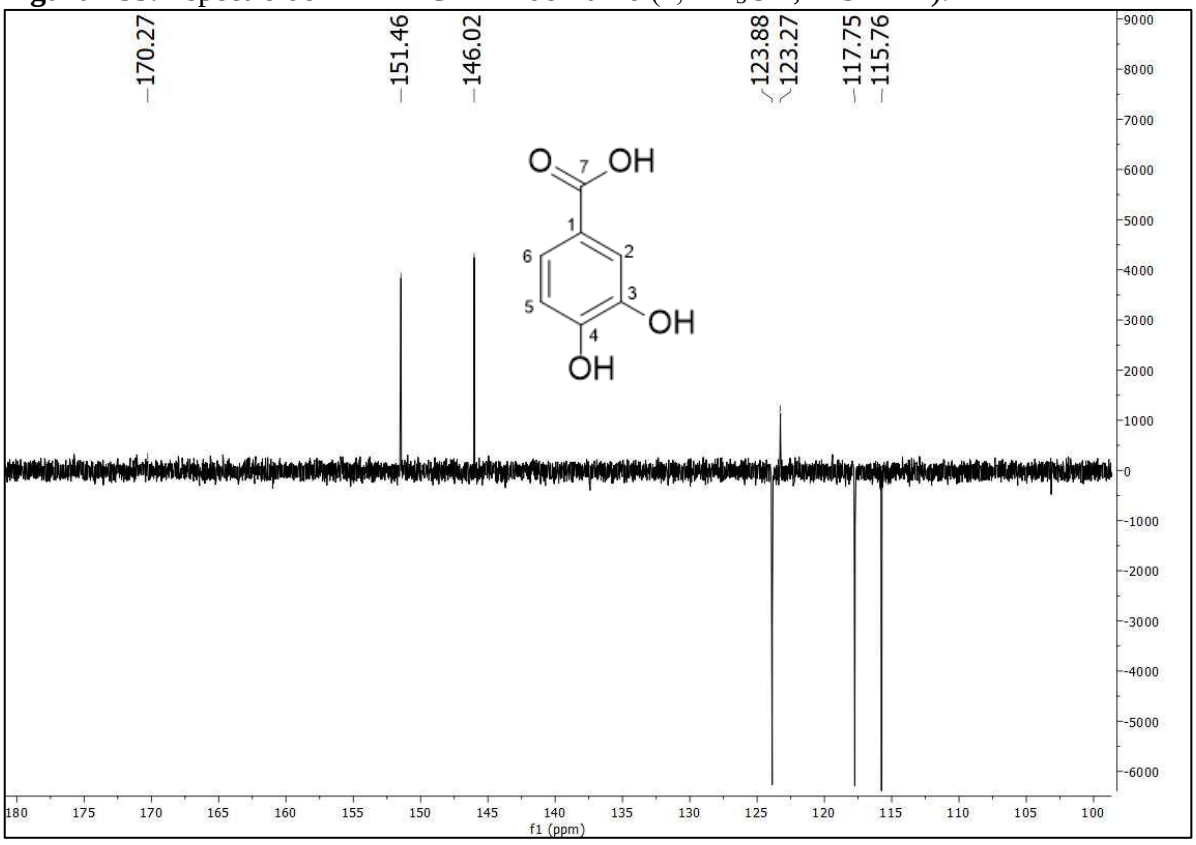


**Figura 154.** Espectro bidimensional de RMN $^{1}H/^{13}C$-HSQC de *Pc*-16 (δ, $CD_3OD$, 500 e 125 MHz).

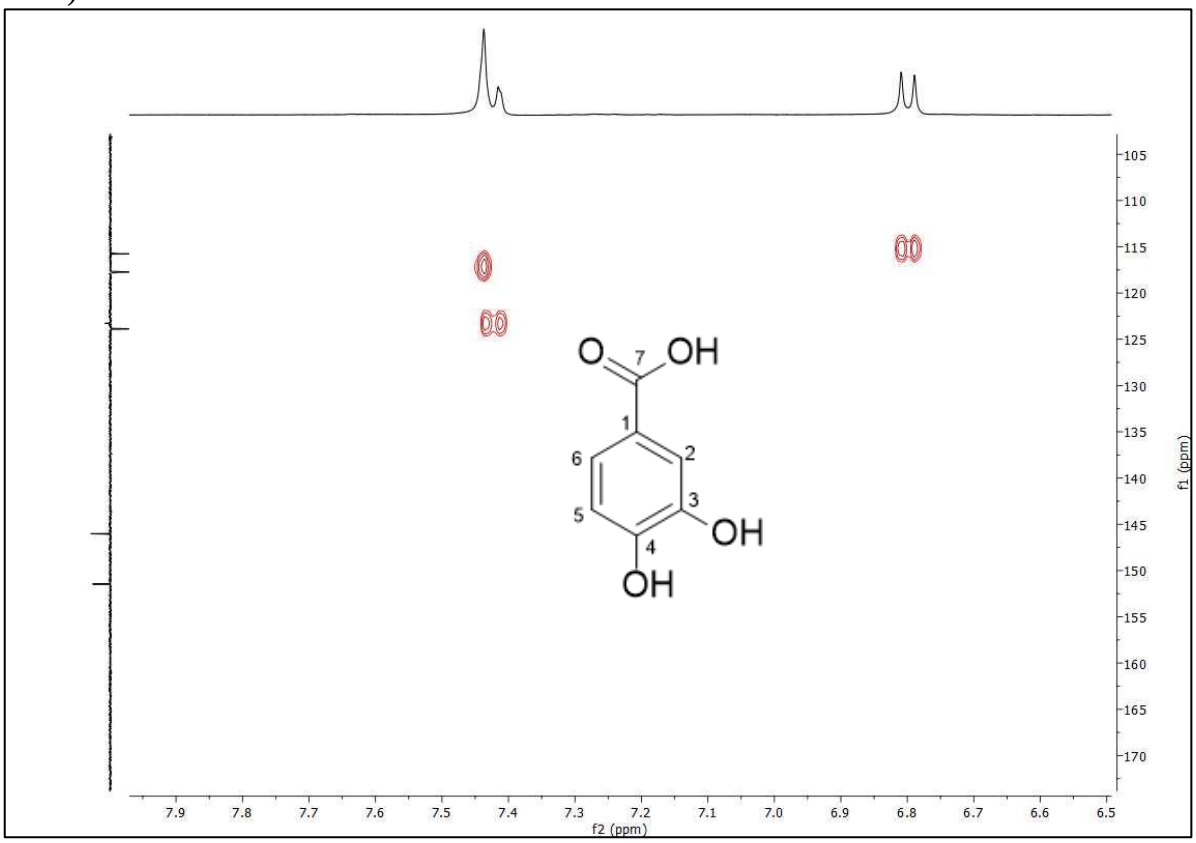
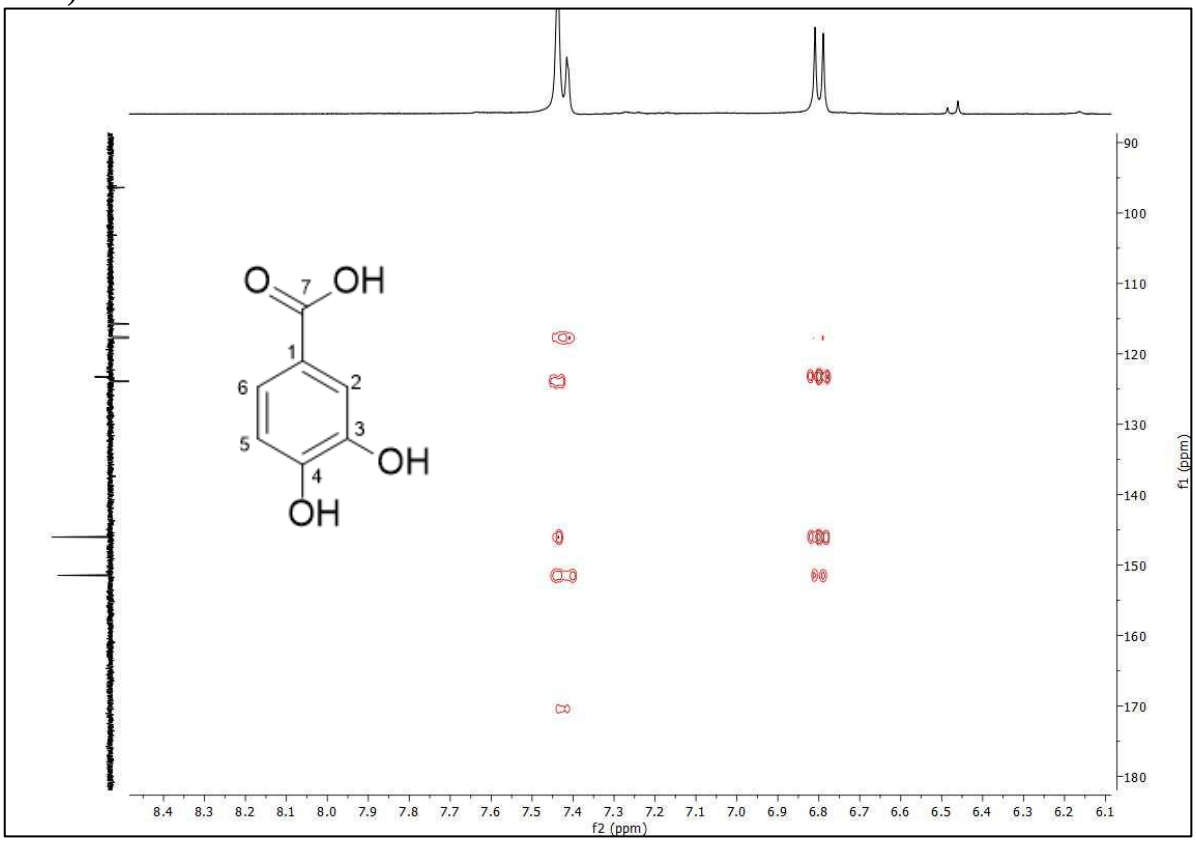



**Figura 155.** Espectro bidimensional de RMN $^{1}H/^{13}C$-HMBC de *Pc*-16 (δ, $CD_3OD$, 500 e 125 MHz).



### 5.4.17 Determinação estrutural de *Pc*-17

O espectro de RMN $^{1}H$ foi obtido em $CD_3OD$ a 400 MHz. Ao analisar seus sinais de absorção foi possível notar a presença de um sistema ABX de substituição, indicado pelos seguintes dupletos: um dupleto em $\delta_H$ 7,10 (1H, *J* =1,9 Hz), um duplo dupleto em $\delta_H$ 7,01 (1H, *J* =8,2, 1,9 Hz) e um dupleto em $\delta_H$ 6,80 (1H, *J* =8,1 Hz), que correspondem aos hidrogênios H-2, H-6, e H-5, respectivamente. Os dupletos em $\delta_H$ 7,05 (2H, *J* =8,5 Hz), referentes aos H-2',H-6' e $\delta_H$ 6,73 (2H, *J* =8,5 Hz), atribuído aos H-3',H-5', indicam o sistema AA'BB' sinalizando a presença de outro anel aromático (MARQUES, et al., 2022) (Figura 158, pág. 211).

A presença de hidrogênio olefínicos, H-7 e H-8, conjugados à carbonilas foram observados em $\delta_H$ 7,43 (1H, *J* =15,7 Hz) e $\delta_H$ 6,41 (1H, *J* =15,7 Hz), respectivamente (Figura 160, pág. 212). Ademais, há a presença de um simpleto em $\delta_H$ 3,86 (3H), atribuído aos hidrogênios de uma metoxila (Figura 161, pág. 213). A partir do valor da constante de acoplamento (*J* =15,7 Hz), é possível afirmar que a dupla ligação da estrutura apresenta configuração *trans* (CHEMAM et al., 2017).

Em relação ao espectro de RMN $^{13}C$, obtido a 100 MHz, utilizando a técnica APT, foi possível identificar 18 sinais de carbono, sendo seis não hidrogenados, sete metínicos, dois metilênicos e uma metila relacionada à metoxila (3-$OCH_3$). Os sinais em $\delta_C$ 149,7 (C-4); $\delta_C$ 149,2 (C-3), $\delta_C$ 128,3 (C-1) e $\delta_C$ 56,4 (3-$OCH_3$), confirmam a presença do anel aromático 1,3,4-trissubstituído, (pág. 22, figura 15). Além disso, a confirmação do sistema AA'BB' ocorreu por meio dos sinais em $\delta_C$ 156,7 (C-4'), $\delta_C$ 131,3 (C-1'), $\delta_C$ 130,7 (C-2',6') e $\delta_C$ 116,4 (C-3',5') (BRITO, 2021) (Figura 162, pág. 213).

O sinal em $\delta_C$ 42,5, evidencia um carbono metileno nitrogenado em C-8' e em $\delta_C$ 35,7, um sinal atribuído ao carbono metileno C-7'. Os carbonos olefínicos em $\delta_C$ 142,0 (C-7) e $\delta_C$ 118,7 (C-8), se mostraram compatíveis com sistemas *α-β* conjugados à carbonila (Figura 162, pág. 213). A análise dos dados espectrais de RMN $^{1}H$ e RMN $^{13}C$ aliada à comparação com os dados da literatura permitiram identificar *Pc*-17a como sendo *N-trans*-feruloiltiramina (Figura 156, pág. 208).

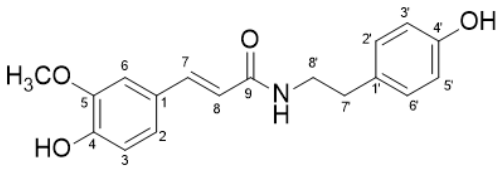



**Figura 156.** *N-trans*-feruloiltiramina.

O mesmo espectro de RMN $^{1}H$ obtido em $CD_3OD$ a 400 MHz, ainda apresentou sinais de absorção na região de prótons aromáticos, indicando também um sistema de ABX de substituição, por meio de um dupleto em $\delta_H$ 7,32 (1H, *J* =1,9 Hz), um duplo dupleto em $\delta_H$ 6,91 (1H, *J* =8,3, 1,9 Hz) e um dupleto em $\delta_H$ 6,75 (1H, *J* =8,3 Hz), atribuídos aos hidrogênios H-2, H-6 e H-5, respectivamente. Outros sinais de dupletos em $\delta_H$ 6,98 (2H, *J* =8,6 Hz) e em $\delta_H$ 6,69 (2H, *J* =8,5 Hz), referentes aos hidrogênios H-2', H-6' e H-3', H-5' que sugerem a presença de um segundo anel aromático (MARQUES, et al., 2022) (Figuras 159 e 160, pág. 212).

Dupletos em $\delta_H$ 6,60 (1H, *J* =12,7 Hz) e $\delta_H$ 5,81 (1H, *J* =12,7 Hz), indicam hidrogênios olefínicos conjugados à carbonila, sendo eles, H-7 e H-8, respectivamente. Devido ao valor da constante de acoplamento de 12,7 Hz é possível afirmar a configuração *cis* para a dupla ligação. Por fim, um simpleto em $\delta_H$ 3,81 (3H) correspondente aos hidrogênios da metoxila também foram evidenciados (CAVALCANTE, et al., 2010; BRITO, 2021) (Figura 161, pág. 213).

Em relação ao espectro de RMN $^{13}C$ obtido a 100 MHz por meio da técnica APT, identificaram-se 18 sinais de carbono. Por meio dos sinais $\delta_C$ 138,3 (C-7) e $\delta_C$ 121,7 (C-8) é possível confirmar a presença de carbonos olefínicos conjugados à carbonila com sistemas *α-β*. Os sinais em $\delta_C$ 148,5 e $\delta_C$ 148,4, são referentes ao carbonos C-4, C-3, respectivamente. Enquanto que o sinal em $\delta_C$ 169,3 indica o carbono carbonílico de amida presente em C-9, o sinal em 56,4 trata-se da metoxila aromática (3-$OCH_3$), (CHEMAM et al., 2017) (Figura 162, pág. 213).

A substância *Pc*-17 apresentou-se como uma resina alaranjada, resultante da mistura das substâncias codificadas como *Pc*-17a e *Pc*-17b. A partir dos dados espectrais de RMN $^{1}H$ e RMN $^{13}C$ aliados à comparação com dados literários (Tabela 34, pág. 210) foi possível identificar *Pc*-17b como sendo *N-cis*-feruloiltiramina (Figura 157, pág. 209).

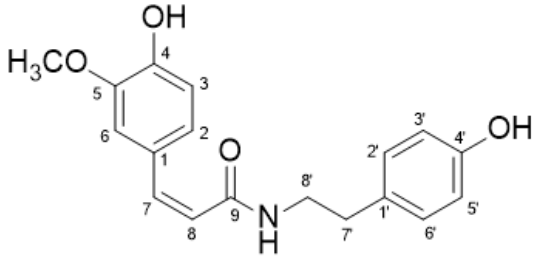



**Figura 157.** *N-cis*-feruloiltiramina.

**Tabela 34.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pc*-17a** e ***Pc*-17b** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) com o modelo ***Mo*-1** e ***Mo*-2** (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz) (BRITO, 2021).

| C | ***Mo*-1** | | ***Pc*-17a** | | ***Mo*-2** | | ***Pc*-17b** | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | **δH** | **δC** | **δH** | **δC** | **δH** | **δC** | **δH** | **δC** |
| **1** | - | 128,3 | - | 128,3 | - | 129,0 | - | 128,5 |
| **2** | 7,11 (d, *J* =1,9 Hz) | 111,5 | 7,10 (d, *J* =1,9 Hz) | 111,5 | 7,36 (d, *J* =2,0 Hz) | 114,0 | 7,32 (d, *J* =1,9 Hz) | 113,9 |
| **3** | - | 149,3 | - | 149,2 | - | 149,2 | - | 148,4 |
| **4** | - | 149,8 | - | 149,7 | - | 149,0 | - | 148,5 |
| **5** | 6,79 (d, *J* =8,0 Hz) | 116,5 | 6,80 (d, *J* =8,1 Hz) | 116,3 | 6,74 (d, *J* =8,2 Hz) | 115,9 | 6,75 (d, *J* =8,3 Hz) | 115,8 |
| **6** | 7,02 (dd, *J* =8,3, 2,0 Hz) | 123,2 | 7,01 (dd, *J* =8,2, 1,9 Hz) | 123,2 | 6,93 (dd, *J* =8,3, 2,3 Hz) | 124,9 | 6,91 (d, *J* =8,3, 1,9 Hz) | 124,7 |
| **7** | 7,43 (d, *J* =15,7 Hz) | 142,0 | 7,43 (d, *J* =15,7 Hz) | 142,0 | 6,61 (d, *J* =12,7 Hz) | 138,4 | 6,60 (d, *J* =12,7 Hz) | 138,3 |
| **8** | 6,40 (d, *J* =15,7 Hz) | 118,7 | 6,41 (d, *J* =15,7 Hz) | 118,7 | 5,81 (d, *J* =12,7 Hz) | 121,7 | 5,81 (d, *J* =12,7 Hz) | 121,7 |
| **9** | - | 169,1 | - | 169,2 | - | 170,7 | - | 169,3 |
| **1'** | - | 131,3 | - | 131,3 | - | 131,6 | - | 131,2 |
| **2'** | 7,05 (d, *J* =8,6 Hz) | 130,7 | 7,05 (*J* =8,5 Hz) | 130,7 | 7,00 (d, *J* =8,6 Hz) | 130,8 | 6,98 (d, *J* =8,6 Hz) | 130,7 |
| **3'** | 6,72 (d, *J* =8,6 Hz) | 116,3 | 6,73 (J=8,5 Hz) | 116,4 | 6,69 (d, *J* =8,6 Hz) | 116,4 | 6,69 (d, *J* =8,5 Hz) | 116,2 |
| **4'** | - | 156,9 | - | 156,7 | - | 157,3 | - | 156,7 |

| | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| **5’** | 6,72, d (8,6) | 116,3 | 6,73 (*J* =8,5 Hz) | 116,4 | 6,69 (d, *J* =8,6 Hz) | 116,4 | 6,69 (d, *J* =8,5 Hz) | 116,2 |
| **6’** | 7,05, d (8,6) | 130,7 | 7,05 (*J* =8,5 Hz) | 130,7 | 7,00 (d, *J* =8,6 Hz) | 130,8 | 6,98 (d, *J* =8,6 Hz) | 130,7 |
| **7’** | 2,75, t (7.5) | 35,8 | 2,75 (*J* =7,4 Hz) | 35,7 | 2,69, t (7.7) | 35,6 | 2,68 (*J* =7,6 Hz) | 35,4 |
| **8’** | 3,46, t (7.6) | 42,5 | 3,46 (*J* =7,0 Hz) | 42,5 | 3,40, t (7.3) | 42,4 | 3,39 (*J* =7,2 Hz) | 42,3 |
| **3-OCH$_3$** | 3,88 (s) | 56,4 | 3,86 (s) | 56,4 | 3,83 (s) | 56,4 | 3,81 (s) | 56,4 |

**Figura 158.** Espectro de RMN $^1$H de *Pc*-17 (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).

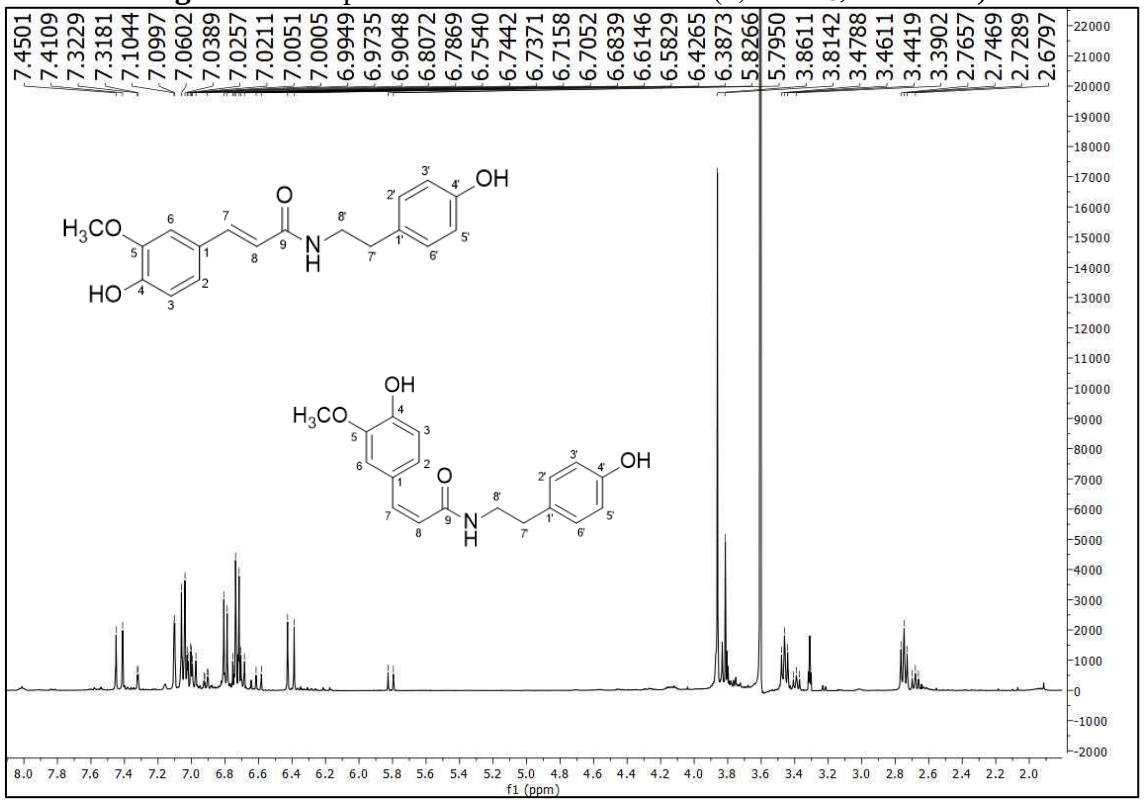


**Figura 159.** Expansão de espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-17 (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).

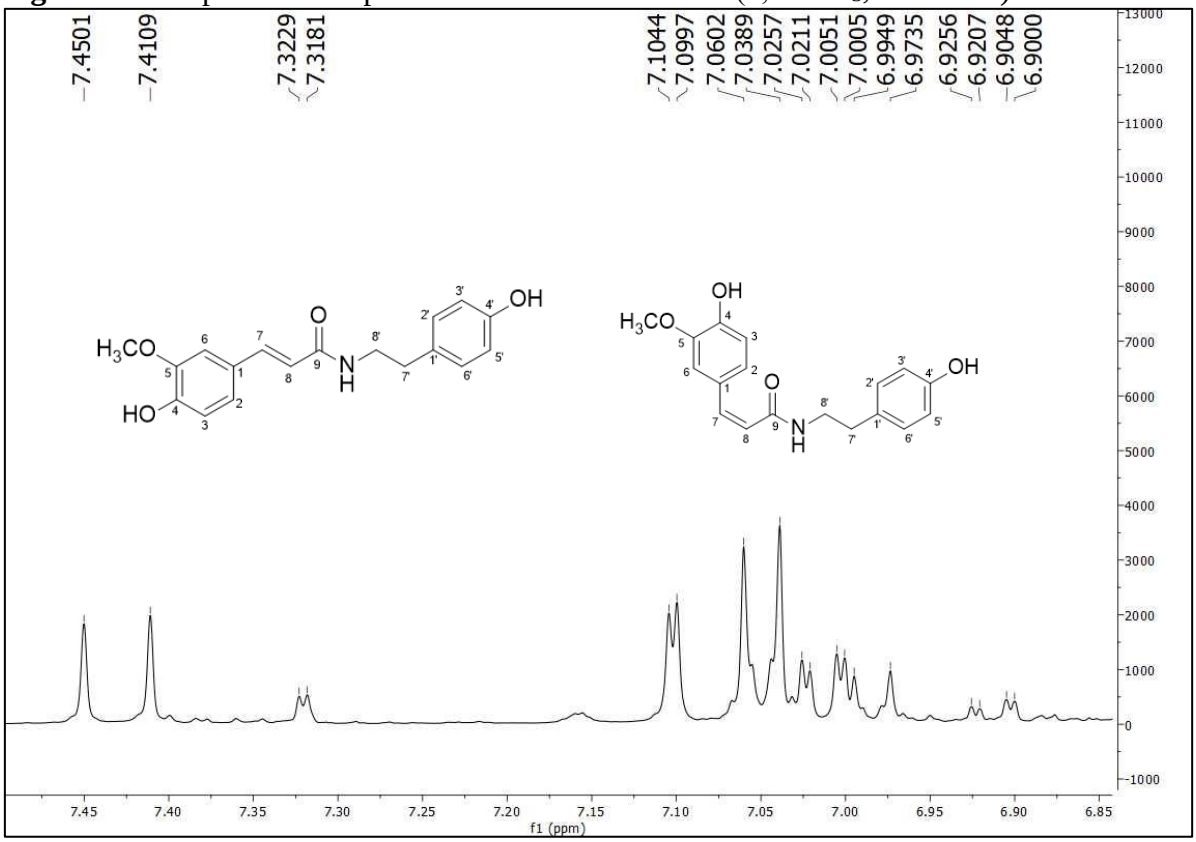



**Figura 160.** Expansão de espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-17 (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).

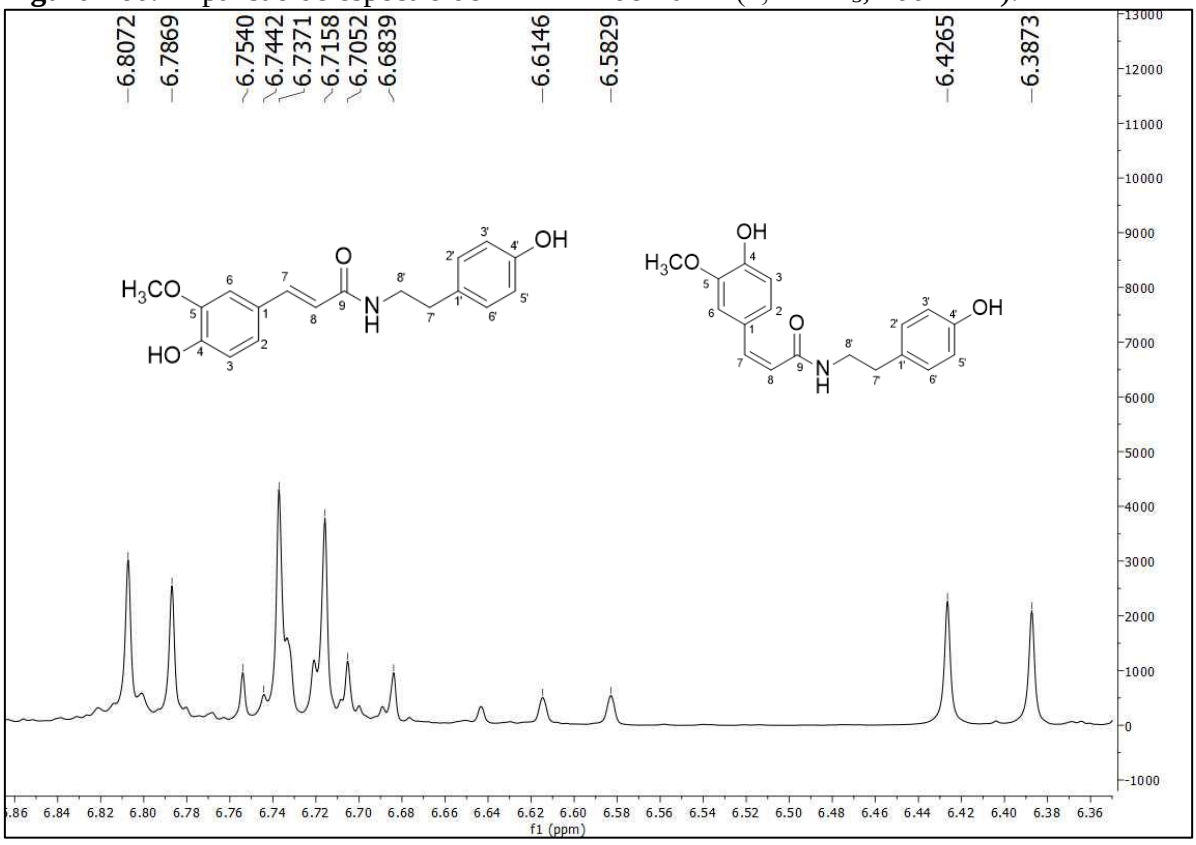


**Figura 161.** Expansão de espectro de RMN $^{1}H$ de *Pc*-17 (δ, $CDCl_3$, 400 MHz).

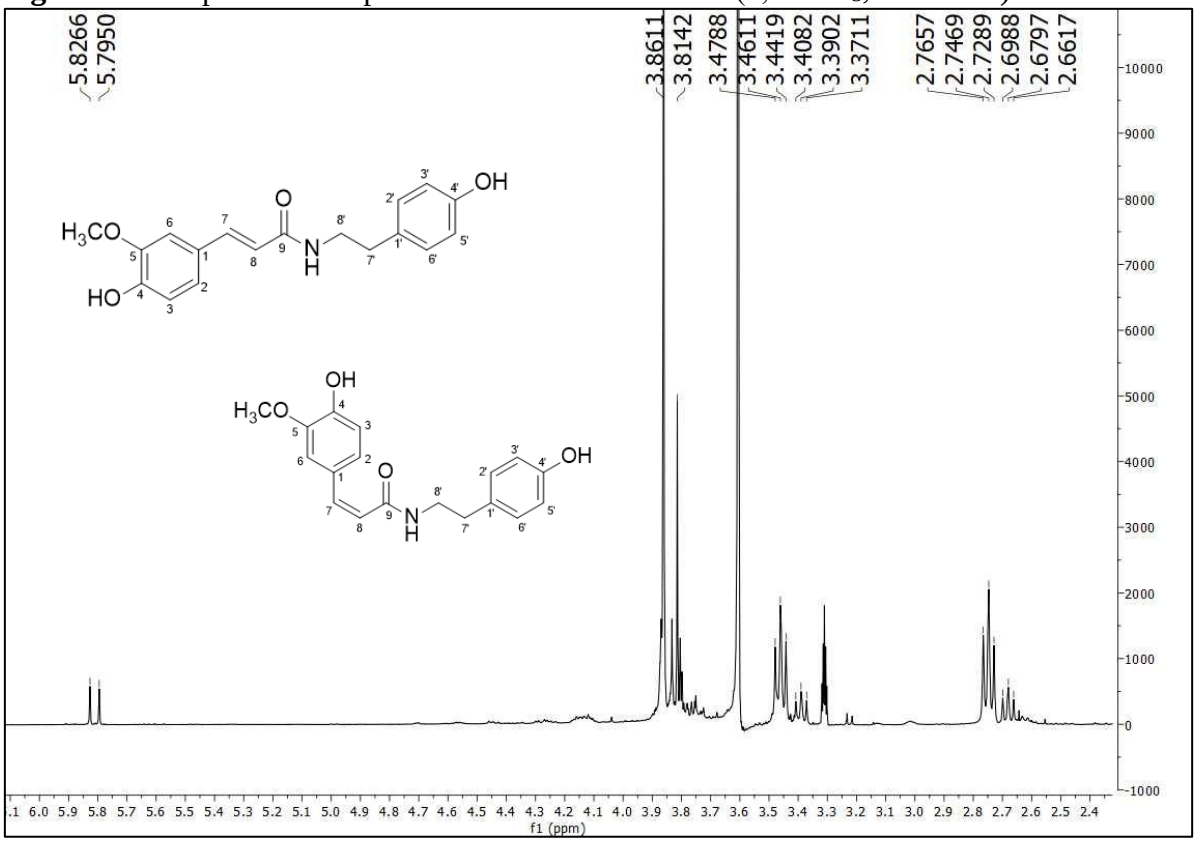



**Figura 162.** Espectro de RMN $^{13}C$-APT de *Pc*-17 (δ, $CDCl_3$, 100 MHz).

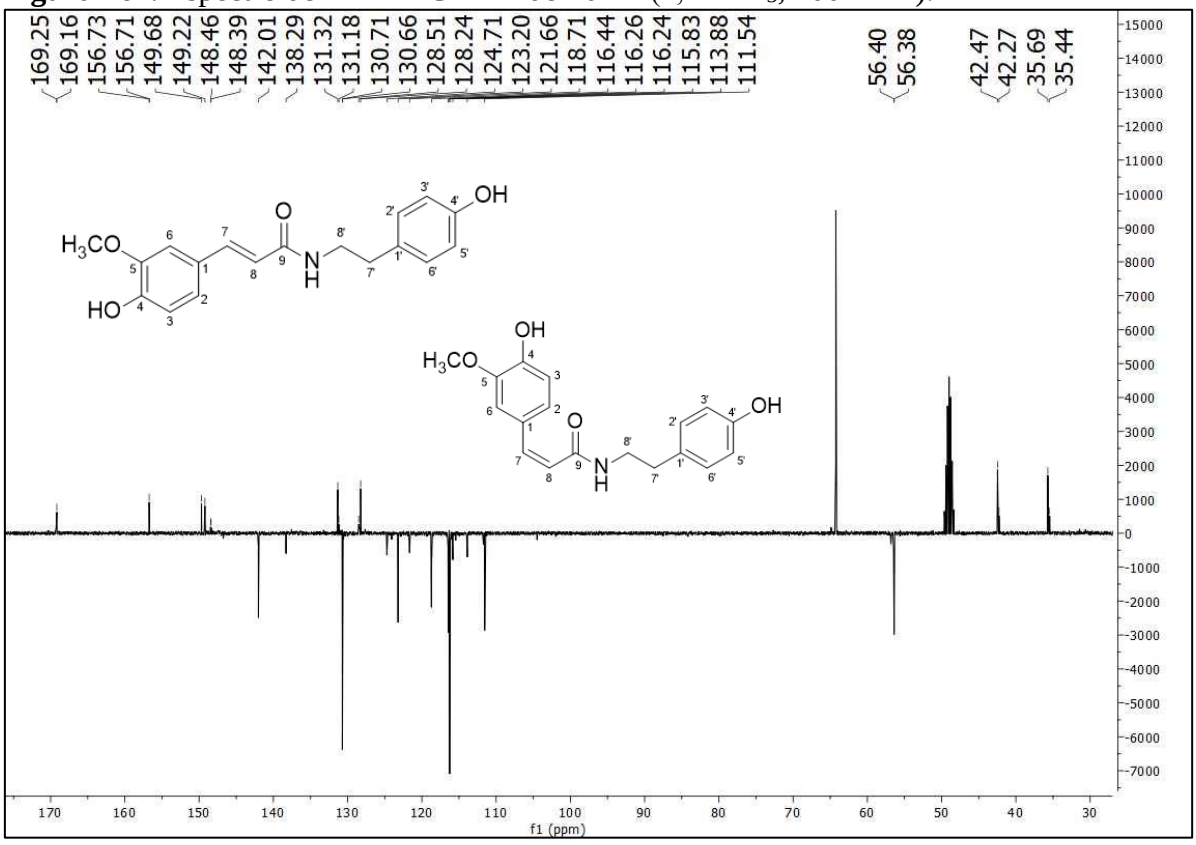


**Figura 163.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HSQC de *Pc*-17 (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz).

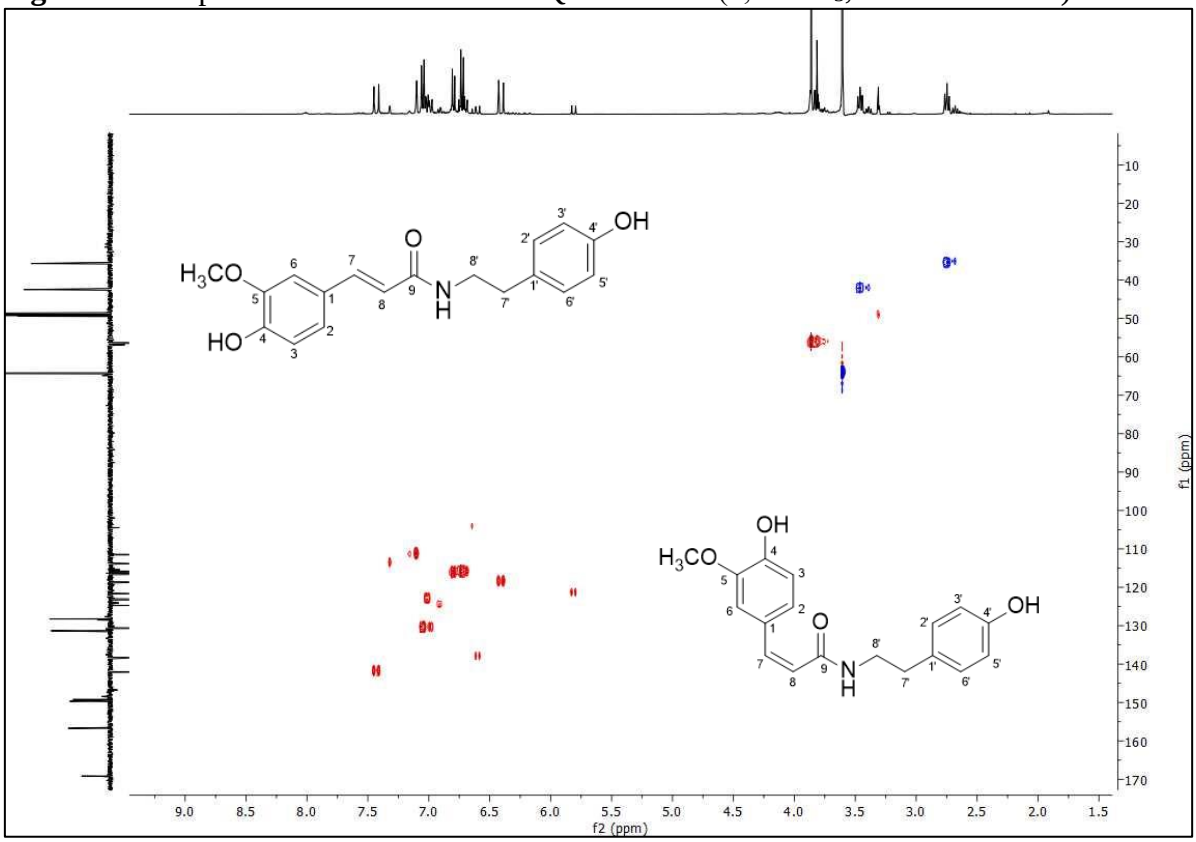
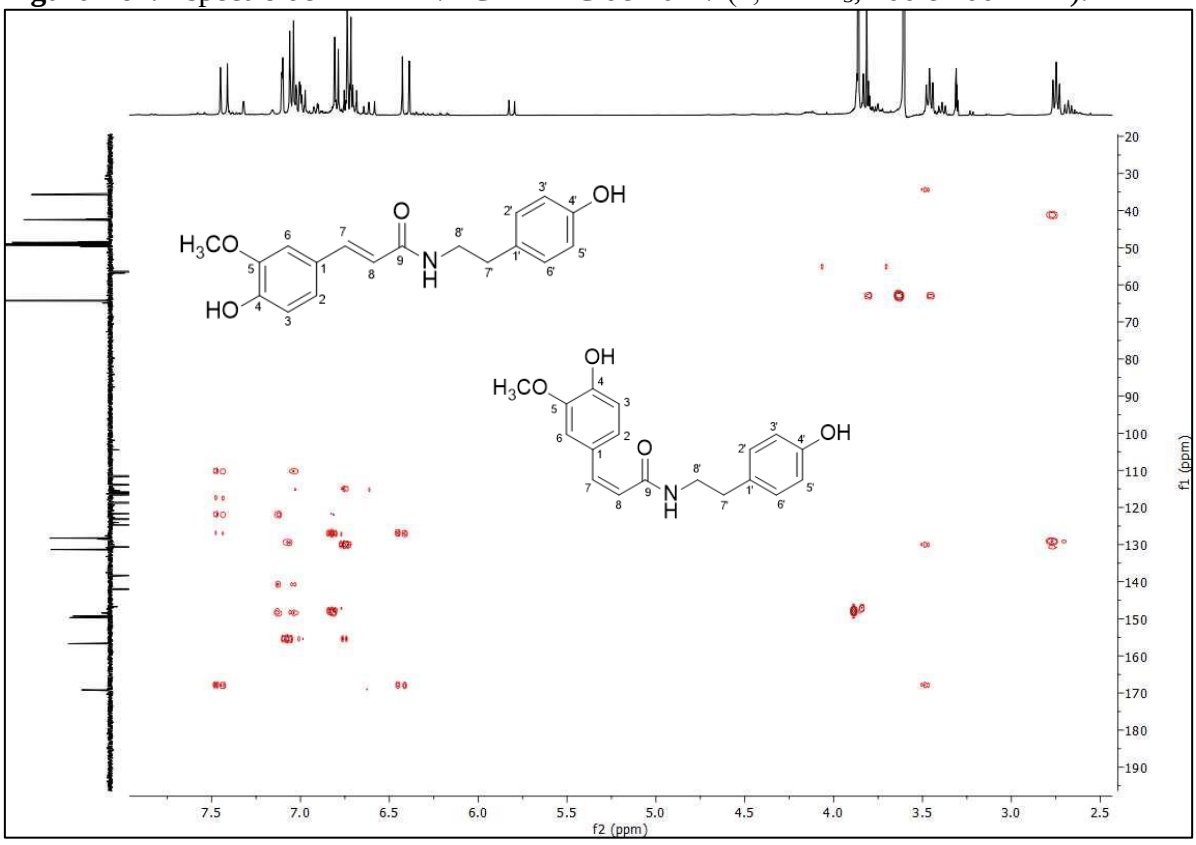


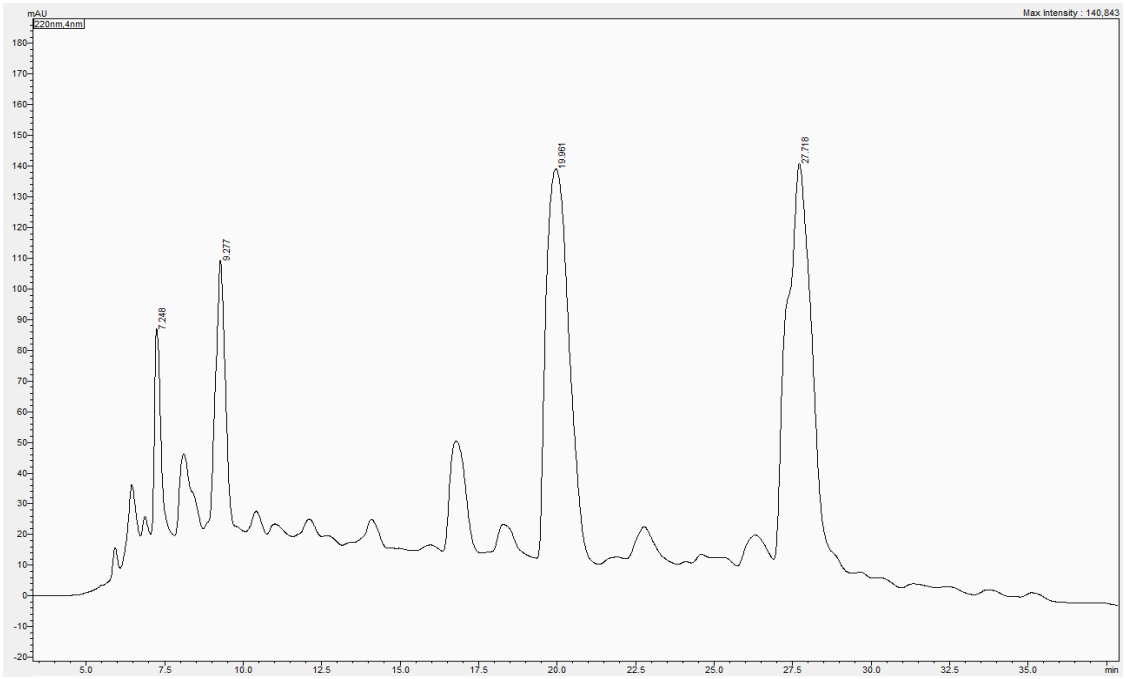

**Figura 164.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HMBC de *Pc*-17 (δ, $CDCl_3$, 400 e 100 MHz).



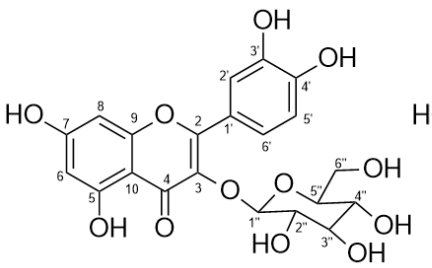
## 5.5 Substâncias isoladas das partes aéreas de *Pavonia blanchetiana*

O estudo fitoquímico das partes aéreas de *Pavonia blanchetiana* conduziu ao isolamento e identificação estrutural de cinco constituintes químicos (Quadro 18, pág. 211).

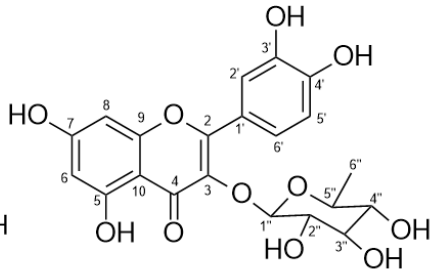
**Figura 165.** Cromatograma da fração 05/07 da fase acetato de etila do EEB das partes aéreas de *Pavonia blanchetiana*.



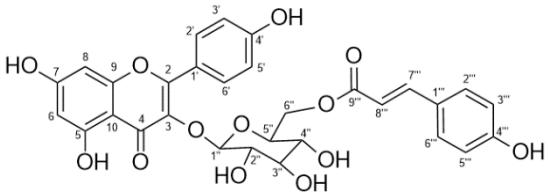

**Quadro 18**. Substâncias isoladas das partes aéreas de *Pavonia blanchetiana*.



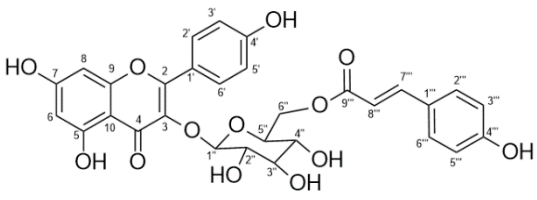
***Pb*-1**: Isoquercitrina



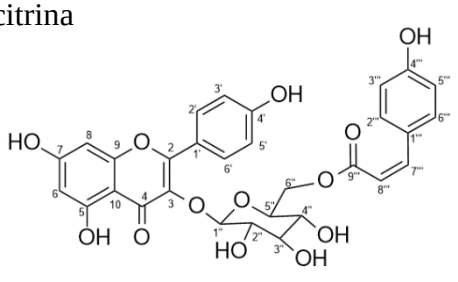
***Pb*-2**: Quercitrina



***Pb*-3**: Tilirosídeo



***Pb*-4a**: *Trans*-Tilirosídeo



***Pb*-4b**: *Cis*-Tilirosídeo

### 5.5.1 Determinação estrutural de *Pb*-1 e *Pb*-2

As substâncias codificadas como *Pb*-1 e *Pb*-2 apresentaram-se, ambas, sob a forma de pó amarelado. Em seu cromatograma apresentam-se como o primeiro e o segundo picos com tempos de retenção de 7,248 e 9,277 minutos, respectivamente (Figura 165, pág. 215).

Ao analisar seus espectros de RMN $^{1}H$ e suas expansões pode-se evidenciar sinais atribuídos ao núcleo de um flavonoide em ambas as substâncias, através dos padrões de acoplamento (Figuras 168 e 169, pág. 222). Sinais de prótons em $\delta_H$ 6,19 e 6,38 ppm foram associados aos hidrogênios das posições H-6 e H-8 do anel A do núcleo de flavonoides, característicos da substituição 5,7-dihidroxilada (CEDEÑO et al., 2019) (Figura 169, pág. 222).

Observou-se ainda na região de prótons aromáticos sinais em $\delta_H$ 7,58, $\delta_H$ 6,83 ($J$ =8,3 Hz) e $\delta_H$ 7,56 ($J$ =2,0 Hz) de *Pb*-1 (Figura 169, pág. 222) e os sinais em $\delta_H$ 7,30, $\delta_H$ 6,87 ($J$ =8,3 Hz) e $\delta_H$ 7,25 ($J$ =8,6 Hz) de *Pb*-2 (Figura 173, pág. 224) correspondentes aos prótons H-2′, H-5′ e H-6′, respectivamente, formando um sistema aromático 1,3,4-trissubstituído no anel B, típico da quercetina (HARDIYANTI et al., 2019).

Em ambas as substâncias, a presença da unidade de açúcar é evidenciada por sinais de prótons anomérico (H-1″), com valor de $\delta_H$ 5,45 ppm para *Pb*-1 (Figura 168, pág. 222) e $\delta_H$ 5,26 ppm para *Pb*-2 (Figura 173, pág. 224). A ausência de prótons na região de $\delta_H$ 6,80, levou a inferir que a posição C-3 encontrava-se substituída, possivelmente pelas unidades de açúcar em cada molécula. Além disso, um sinal em $\delta_H$ 0,82 ($J$ =5,9 Hz) de *Pb*-2 foi atribuído a sinais de hidrogênios metílicos, típico de ramnoses (BLUNDER et al., 2017).

Ao analisar o espectro de carbono e suas expansões foram vistas absorções de carbonos carbonílicos em C-4 característicos de flavonois, para ambas as moléculas (*Pb*-1 e *Pb*-2), absorvendo em $\delta_C$ 177,77 e 177,72 ppm, respectivamente. Sinais dos carbonos oxigenados absorveram em $\delta_C$ 133,71, 161,66, 165,54, 145,38, 149,12 ppm em *Pb*-1 (Figura 168, pág. 219) e absorções em $\delta_C$ 134,21, 161,32, 164,79, 148,58, 145,30 ppm em *Pb*-2, referentes aos carbonos C-3, C-5, C-7, C-3′ e C-4′, respectivamente de ambos os compostos (OLDONI t al., 2021) (Figura 170, pág. 223).

Sinais dos carbonos anoméricos foram visualizados em $\delta_C$ 101,42 para *Pb*-1 (Figura 170, pág. 223) e $\delta_C$ 101, 86 para *Pb*-2 (Figura 174, pág. 225) e diferenciando o

tipo de açúcar ligado à estrutura da quercetina foi evidenciado um sinal de carbono metilênico em 61,43 para *Pb*-1 e 17,55 para *Pb*-2, fortalecendo a proposta de que a substância *Pb*-1 se trataria de uma quercetina com unidade de glicose (isoquercitrina) e para *Pb*-2, uma quercetina com unidade de ramnose ligada no C-3 (quercitrina) (KIM et al., 2025).

A confirmação dessas ligações osídicas na posição C-3 foi atribuída após análise da correlação heteronuclear de HMBC observada entre H-1″ e o carbono C-3 da aglicona de ambas as moléculas. Os demais prótons do açúcar (H-2″ a H-5″) foram atribuídos com base nas correlações HSQC, enquanto o grupo metílico característico da ramnose (H-6″) apresenta correlação HSQC com o carbono metílico correspondente e correlações HMBC com os carbonos C-4″ e C-5″. O conjunto dessas evidências confirma a presença de uma *α*-L-ramnopiranose ligada à quercetina, o padrão de deslocamento químico do próton anomérico é compatível com uma configuração α (PHOOPHA et al., 2020) (Figuras 171 e 172, págs. 223-224).

Por outro lado, a isoquercitrina apresenta uma unidade de *β*-D-glicopiranose, caracterizada pela ausência de sinal de grupo metílico e pela presença de sinais correspondentes a uma hexose totalmente oxigenada. A constante de acoplamento do próton anomérico indica configuração *β*, e as correlações HSQC e HMBC permitem a atribuição completa dos carbonos C-2″ a C-6″ da glicose (Figuras 175 e 176, págs. 225-226).

O conjunto dos dados espectroscópicos de RMN unidimensional e bidimensional (Tabela 35 e 36, págs. 219-220) confirmam que isoquercitrina (Figura 166, pág. 218) e quercitrina (Figura 167, pág. 218) compartilham o mesmo núcleo flavonoídico, diferindo exclusivamente pela identidade do açúcar ligado à posição C-3, estando os dados obtidos em total concordância com aqueles descritos na literatura para ambas as substâncias (WAN et al., 2012; PHOOPHA et al., 2020).

Revisões fitoquímicas indicam que glicosídeos de quercetina estão distribuídos entre muitos gêneros da família Malvaceae, incluindo *Abutilon*, *Hibiscus*, *Pavonia* e *Sida*, o que reforça o padrão quimiotaxonômico dos flavonois glicosilados na família. Estes compostos foram isolados e descritos, pela primeira vez, na espécie *Pavonia blanchetiana*, porém já isolado antes na espécie *Pavonia xanthogloea* (MOSTARDEIRO, et al., 2014).

Os flavonoides glicosilados quercitrina e isoquercitrina têm sido amplamente estudados devido às suas diversas atividades biológicas. Ambos apresentam potente ação

antioxidante (QIU et al., 2019; LI et al., 2016). Estudos *in vitro* e *in vivo* também demonstram atividade anti-inflamatória, por meio da inibição de citocinas pró-inflamatórias (TNF-α, IL-1β, IL-6) e da via de sinalização NF-κB (LEE et al., 2022).

Adicionalmente, a isoquercitrina apresentou potencial antiviral, prevenindo a ligação e a entrada do vírus influenza A nas células, além de exercer efeito virucida e inibir a liberação de partículas virais por meio do bloqueio da atividade da neuraminidase (CHO; LEE; MA, 2022). Efeitos cardioprotetores e neuroprotetores foram observados, reduzindo o estresse oxidativo e a inflamação em modelos de isquemia/reperfusão e de estresse cerebral (KIM; KIM; SONG, 2020).

No contexto metabólico, quercitrina e isoquercitrina demonstram atividade antidiabética, regulando glicemia e melhorando a sensibilidade à insulina, com isoquercitrina apresentando efeitos mais pronunciados devido à maior absorção intestinal (ZHANG et al., 2018). Estudos com atividades anticancerígenas evidenciam que ambos modulam a apoptose, a proliferação celular e a angiogênese em diferentes linhas tumorais, sugerindo potencial farmacológico promissor (ALSHARAIRI, 2023).

Essas características destacam quercitrina e isoquercitrina como compostos bioativos de interesse farmacológico, cuja presença em diversas espécies vegetais, inclusive da família Malvaceae, justifica estudos fitoquímicos e farmacológicos adicionais.

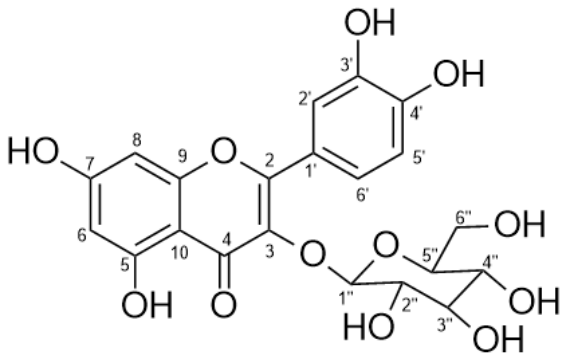



**Figura 166.** Isoquercitrina

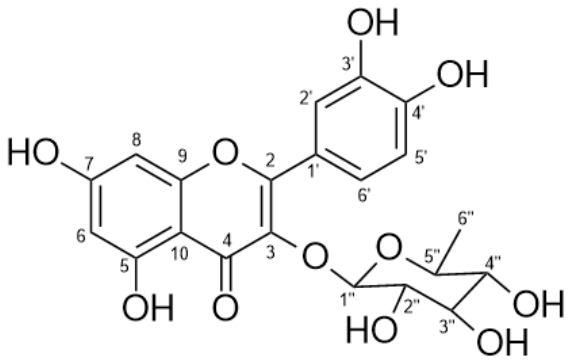



**Figura 167.** Quercitrina

**Tabela 35.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pb*-1** (δ, DMSO-$d_6$, 500 e 125 MHz) e ***Pb*-2** (δ, DMSO-$d_6$, 500 e 125 MHz) com modelos da literatura ***Mo*-1** (δ, DMSO-$d_6$, 500 e 125 MHz) (WAN et al., 2012) e ***Mo*-2** ($CD_3OD$, 500 e 125 MHz) (PHOOPHA et al., 2020).

| C | ***Pb*-1** | | ***Mo*-1** | | ***Pb*-2** | | ***Mo*-2** | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** |
| **2** | - | 156,86 | - | 157,30 | - | 157,25 | - | 158,51 |
| **3** | - | 133,71 | - | 134,20 | - | 134,21 | - | 136,24 |
| **4** | - | 177,77 | - | 178,10 | - | 177,72 | - | 179,64 |
| **5** | - | 161,66 | - | 161,50 | - | 161,32 | - | 163,18 |
| **6** | 6,17 (s, 1H) | 99,30 | 6,20 (d, *J* =2,1 Hz, 1H) | 98,40 | 6,19 (s, 1H) | 98,88 | 6,19 (*d*, *J* =2,1 Hz) | 99,81 |
| **7** | - | 165,54 | - | 164,50 | - | 164,79 | - | 165,82 |
| **8** | 6,38 (s, 1H) | 94,03 | 6,40 (d, *J* =2,1 Hz, 1H) | 93,30 | 6,38 (s, 1H) | 93,75 | 6,36 (*d*, *J* =2,1 Hz) | 94,72 |
| **9** | - | 156,50 | - | 157,00 | - | 156,53 | - | 159,30 |
| **10** | - | 104,10 | - | 103,90 | - | 103,94 | - | 105,92 |
| **1'** | - | 121,54 | - | 121,60 | - | 120,75 | - | 123,00 |
| **2'** | 7,58 (s, 1H) | 116,63 | 7,71 (d, *J* =2,1 Hz, 1H) | 116,10 | 7,30 (s, 1H) | 115,68 | 7,33 (*d*, *J* =2,1 Hz) | 116,97 |
| **3'** | - | 145,38 | - | 144,40 | - | 148,58 | - | 149,76 |
| **4'** | - | 149,12 | - | 148,40 | - | 145,30 | - | 146,38 |
| **5'** | 6,83 (d, *J* =8,3 Hz, 1H) | 115,72 | 6,87 (d, *J* =8,5 Hz, 1H) | 114,60 | 6,87 (d, *J* =8,3 Hz, 1H) | 115,52 | 6,90 (*d*, *J* =8,3 Hz) | 116,37 |
| **6'** | 7,56 (d, *J* =2,0 Hz, 1H) | 122,01 | 7,60 (dd, *J* =8,5; 2,1 Hz, 1H) | 121,40 | 7,25 (d, *J* =8,6 Hz, 1H) | 121,14 | 7,29 (*dd*, *J* =8.3; 2,2 Hz) | 122,86 |

| | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| **1’’** | 5,45 (d, *J* =7,3 Hz, 1H) | 101,42 | 5,26 (d, *J* =7,8 Hz, 1H) | 102,80 | 5,26 (s, 1H) | 101,86 | 5,34 (*d*, *J* =1,6 Hz) | 103,52 |
| **2’’** | 3,24 (m, 1H) | 74,58 | 3,55-3,40 (m, 3H) | 74,30 | 3,98 (m, 1H) | 70,11 | 4,21 (*dd*, *J* =3,4; 1,7 Hz) | 71,91 |
| **3’’** | 3,09 (d, *J* =4,4 Hz, 2H) | 76,99 | 3,55-3,40 (m, 3H) | 76,70 | 3,16 (d, *J* =8,2 Hz, 1H) | 70,63 | 3,74 (*dd*, *J* =9,4; 3,4 Hz) | 72,14 |
| **4’’** | 3,09 (d, *J* =4,4 Hz, 2H) | 70,40 | 3,55-3,40 (m, 3H) | 69,80 | 3,52 (d, *J* =8,6 Hz, 1H) | 71,24 | 3,32 (*t*, *J* =9,5 Hz) | 73,28 |
| **5’’** | 3,24 (m, 1H) | 78,01 | 3,23 (m, 1H) | 77,00 | 3,22 (d, *J* =6,8 Hz, 1H) | 70,40 | 3,44 (*dd*, *J* =9,7; 6,4 Hz) | 72,01 |
| **6’’** | 3,33 (dd, *J* =11,4; 4,7 Hz, 1H) | 61,43 | 3,73 (dd, *J* =2,4; 11,9 Hz, 1H); 3,63 (dd, *J* =2,4; 11,9 Hz, 1H) | 61,10 | 0,82 (d, *J* =5,9 Hz, 3H) | 17,55 | 0,94 (*d*, *J* =6,0 Hz) | 17,63 |

**Tabela 36.** Dados espectrais de HSQC e HMBC de ***Pb*-1 e *Pb*-2** (δ, DMSO-$d_6$, 500 e 125 MHz).

| **C** | ***Pb*-1** | | | | ***Pb*-2** | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | **HSQC** | | **HMBC** | | **HSQC** | | **HMBC** | |
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$^2J$** | **$^3J$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$^2J$** | **$^3J$** |
| **2** | - | 156,86 | - | - | - | 157,25 | - | - |
| **3** | - | 133,71 | - | - | - | 134,21 | - | - |
| **4** | - | 177,77 | - | - | - | 177,72 | - | - |
| **5** | - | 161,66 | - | - | - | 161,32 | - | - |
| **6** | 6,17 (s, 1H) | 99,30 | C-5; C-7 | C-6; C-10 | 6,19 (s, 1H) | 98,88 | C-7 | C-8; C-10 |
| **7** | - | 165,54 | - | - | - | 164,79 | - | - |
| **8** | 6,38 (s, 1H) | 94,03 | C-7; C-9 | C-8; C-10 | 6,38 (s, 1H) | 93,75 | C-7 | C-6; C-10 |

| | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| **9** | - | 156,50 | - | - | - | 156,53 | - | - |
| **10** | - | 104,10 | - | - | - | 103,94 | - | - |
| **1’** | - | 121,54 | - | - | - | 120,75 | - | - |
| **2’** | 7,58 (s, 1H) | 116,63 | C-3’ | C-2; C-6’ | 7,30 (s, 1H) | 115,68 | C-1’ | C-2; C-3’; C-4’ |
| **3’** | - | 145,38 | - | - | - | 148,58 | - | - |
| **4’** | - | 149,12 | - | - | - | 145,30 | - | - |
| **5’** | 6,83 (d, *J* =8,3 Hz, 1H) | 115,72 | C-4’; C-6’ | C-3’ | 6,87 (d, *J* =8,3 Hz, 1H) | 115,52 | C-4’ | C-1’; C-3’ |
| **6’** | 7,56 (d, *J* =2,0 Hz, 1H) | 122,01 | - | C-2’; C-4’ | 7,25 (d, *J* =8,6 Hz, 1H) | 121,14 | C-5’ | C-2 |
| **1’’** | 5,45 (d, *J* =7,3 Hz, 1H) | 101,42 | C-2’’ | C-3 | 5,26 (s, 1H) | 101,86 | - | C-3; C-3’’ |
| **2’’** | 3,24 (m, 1H) | 74,58 | C-1’’ | - | 3,98 (m, 1H) | 70,11 | C-3’’ | C-4’’ |
| **3’’** | 3,09 (d, *J* =4,4 Hz, 2H) | 76,99 | C-3’’; C-4’’; C-5’’ | C-1’’; C-6’’ | 3,16 (d, *J* =8,2 Hz, 1H) | 70,63 | C-2’’ | - |
| **4’’** | 3,09 (d, *J* =4,4 Hz, 2H) | 70,40 | C-3’’; C-4’’; C-5’’ | C-1’’; C-6’’ | 3,52 (d, *J* =8,6 Hz, 1H) | 71,24 | C-3’’ | - |
| **5’’** | 3,24 (m, 1H) | 78,01 | C-4’’ | C-3’’ | 3,22 (d, *J* =6,8 Hz, 1H) | 70,40 | C-4’’ | - |
| **6’’** | 3,33 (dd, *J* =11,4; 4,7 Hz, 1H) | 61,43 | C-5’’ | C-4’’ | 0,82 (d, *J* =5,9 Hz, 3H) | 17,55 | - | C-4’’ |

**Figura 168.** Espectro de RMN $^{1}$H de *Pb*-1 (δ, DMSO-$d_6$, 500 MHz).

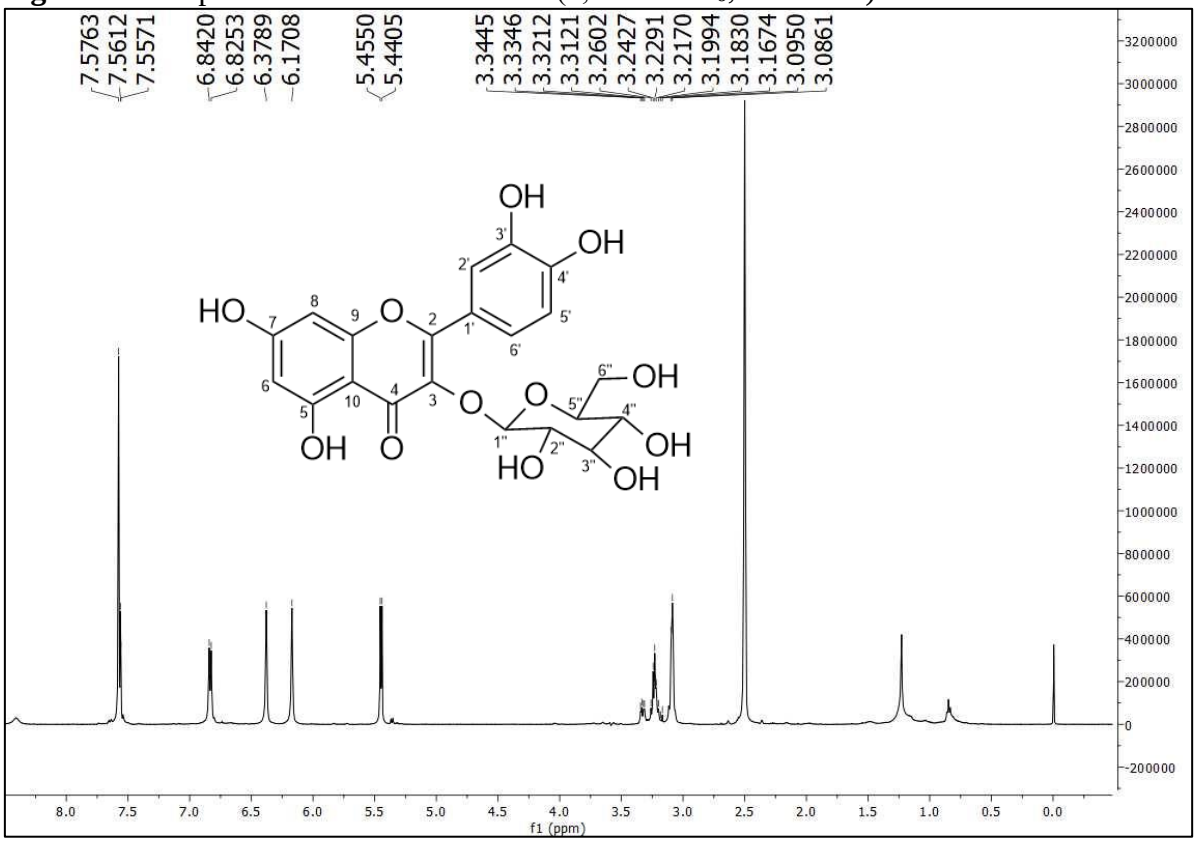



**Figura 169.** Expansão do espectro de RMN $^{1}$H de *Pb*-1 (δ, DMSO-$d_6$, 500 MHz).

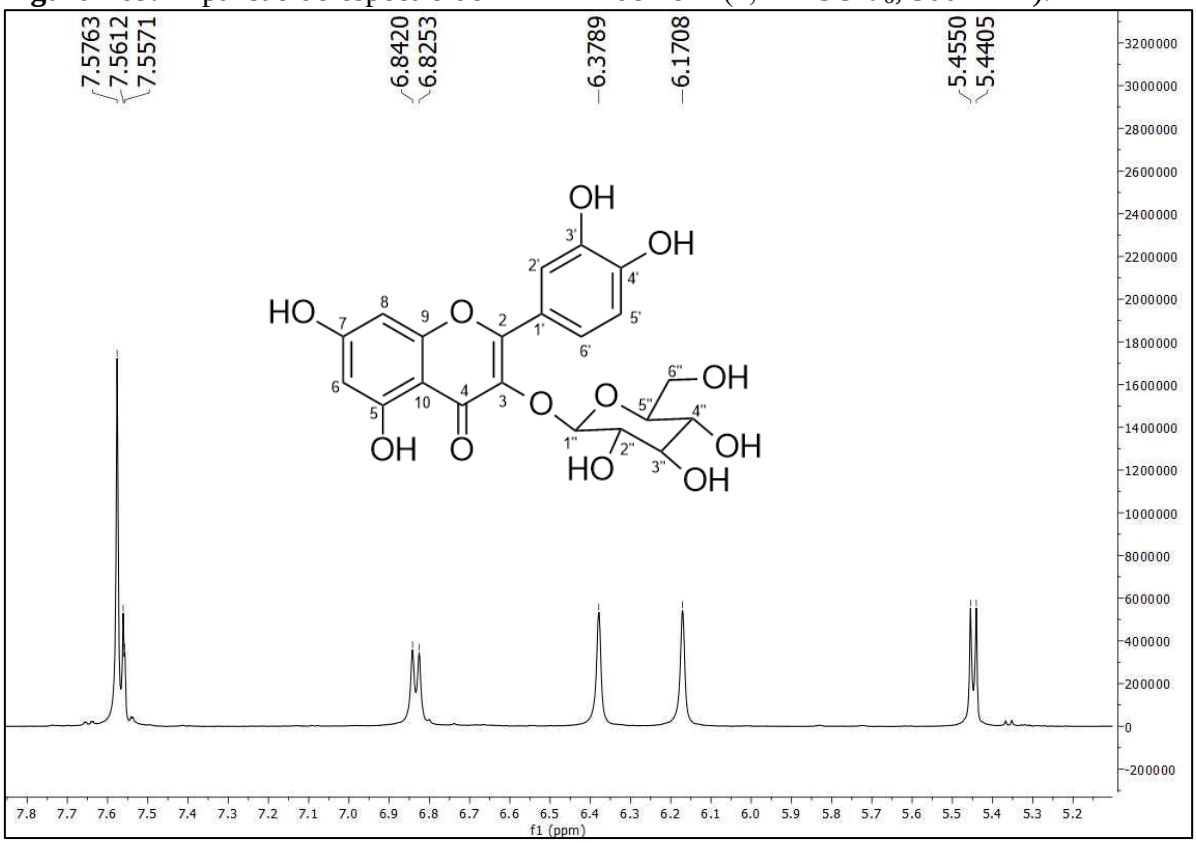


**Figura 170.** Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pb*-1 (δ, DMSO-*d*$_6$, 125 MHz).

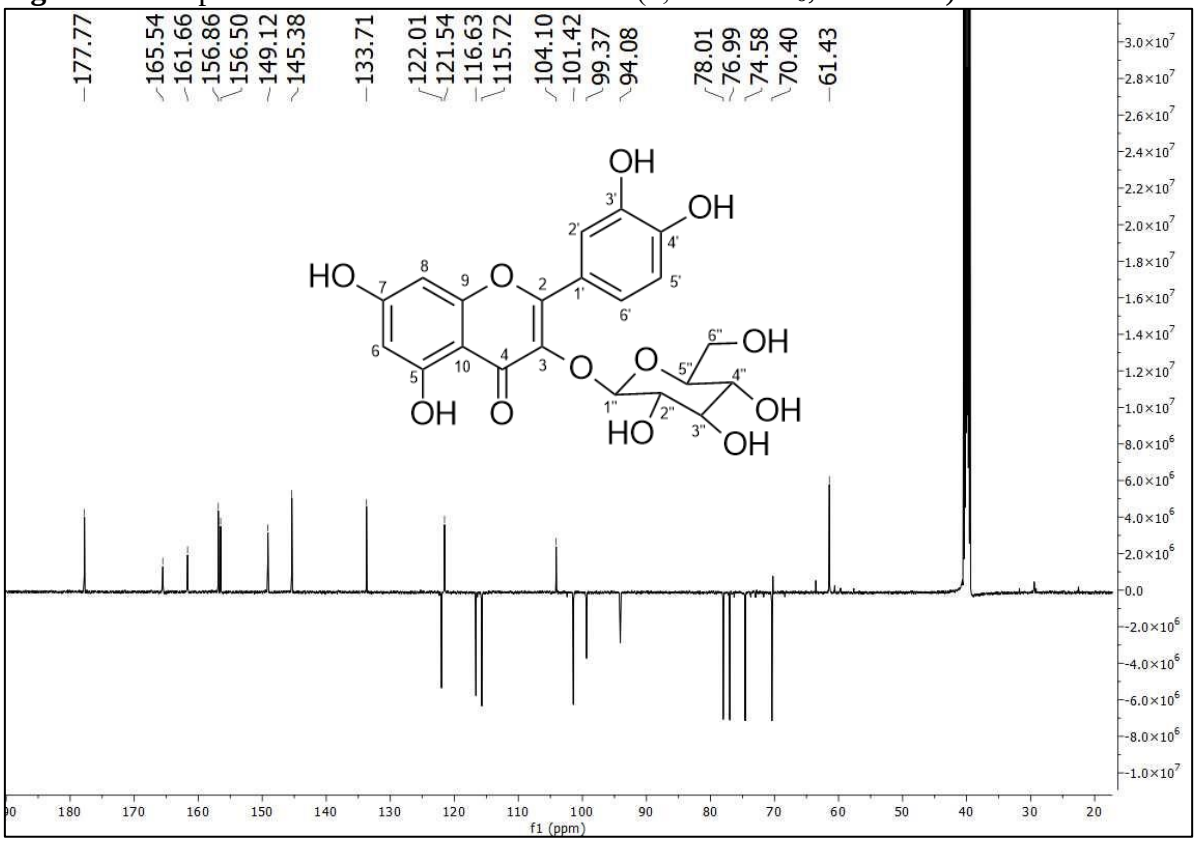



**Figura 171.** Espectro de RMN $^{1}$H/$^{13}$C-HSQC de *Pb*-1 (δ, DMSO-*d*$_6$, 500 e 125 MHz).

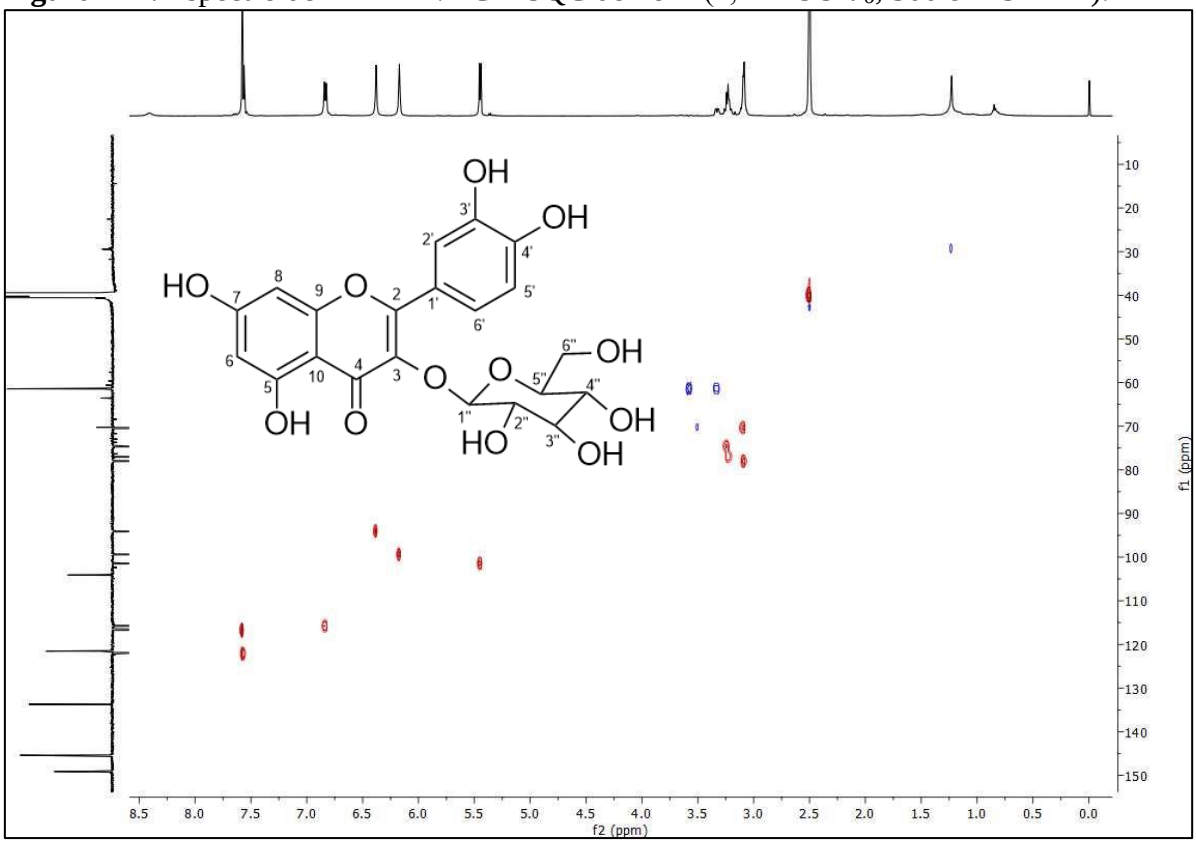


**Figura 172.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HMBC de *Pb*-1 (δ, DMSO-$d_6$, 500 e 125 MHz).

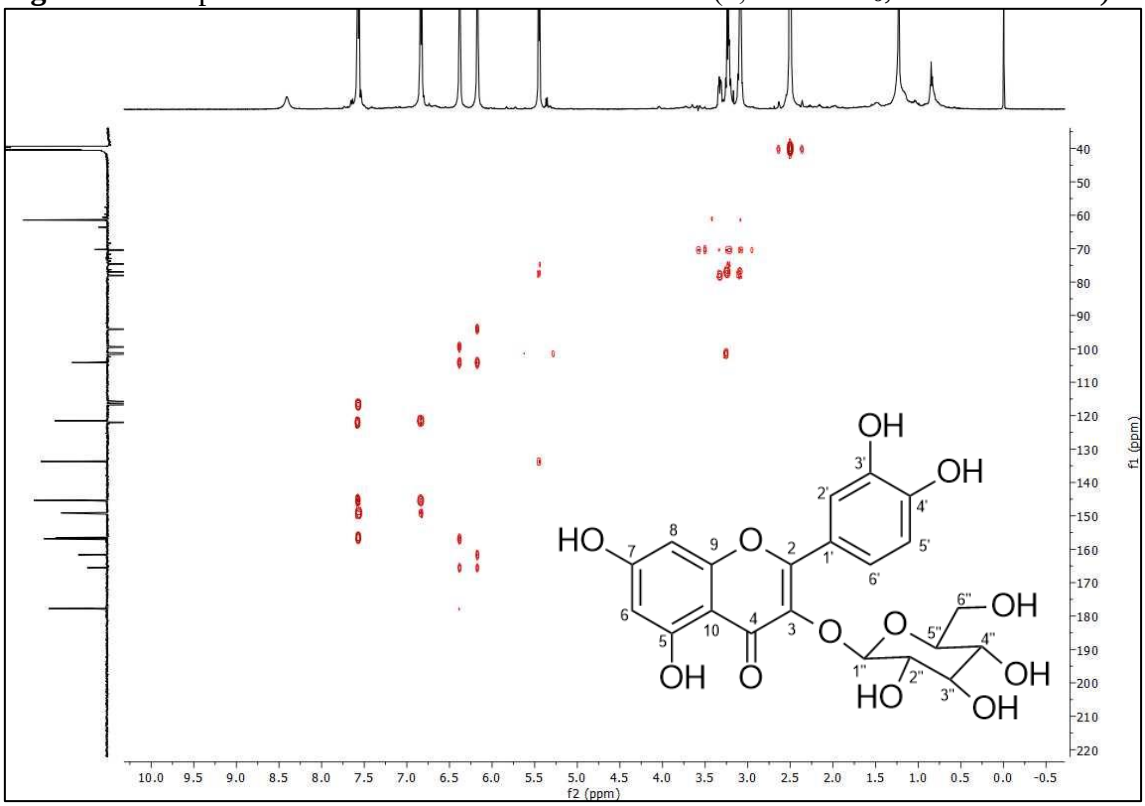



**Figura 173.** Espectro de RMN $^{1}H$ de *Pb*-2 (δ, DMSO-$d_6$, 500 MHz).

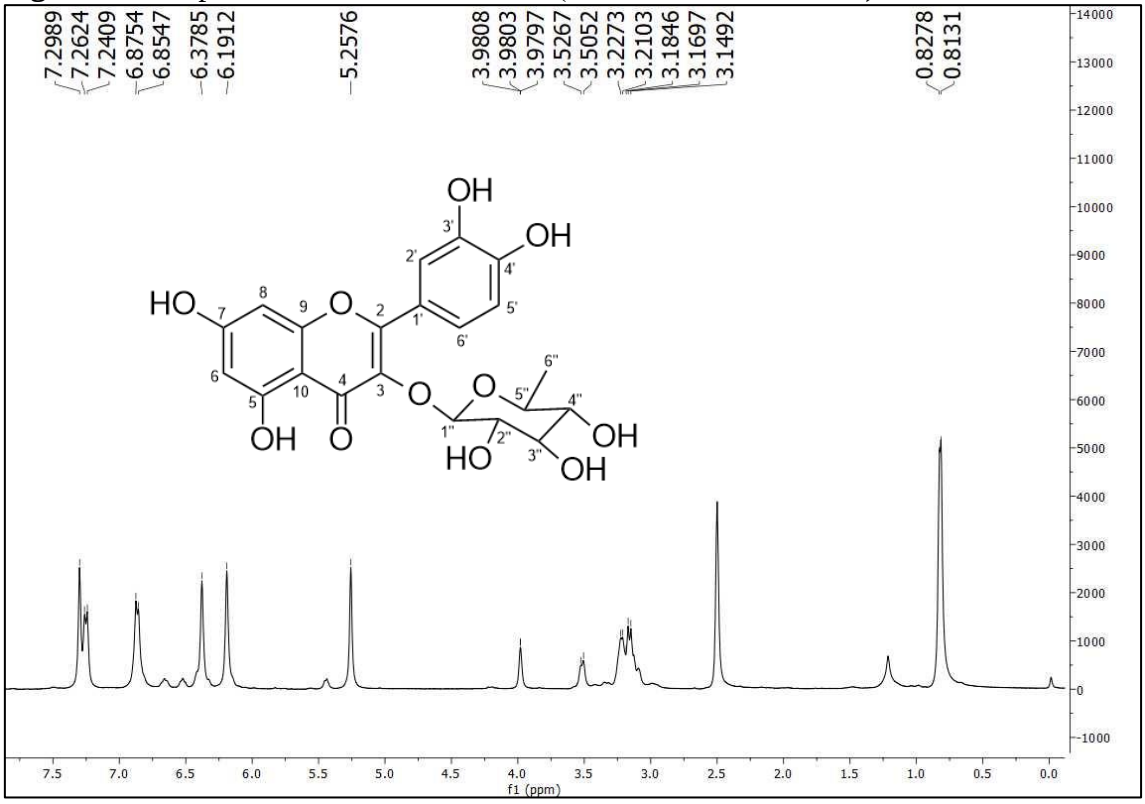


**Figura 174.** Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pb*-2 (δ, DMSO-$d_6$, 125 MHz).

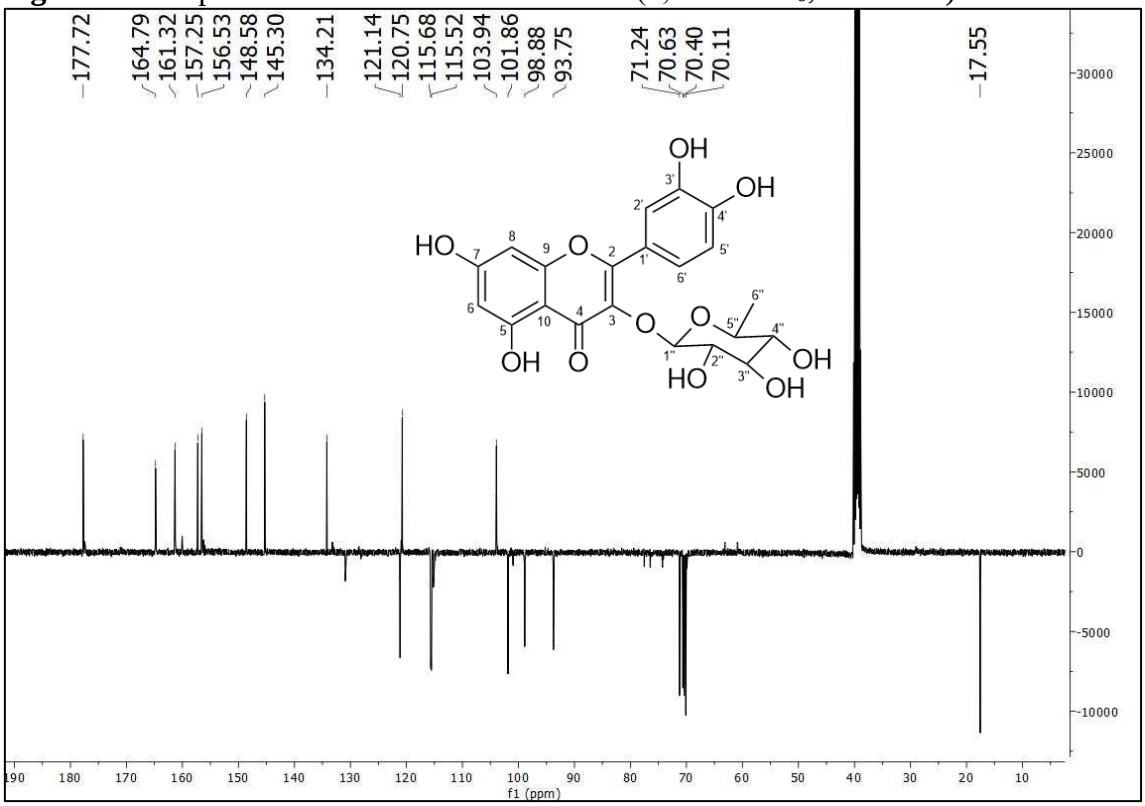



**Figura 175.** Espectro de RMN $^{1}$H/$^{13}$C-HSQC de *Pb*-2 (δ, DMSO-$d_6$, 500 e 125 MHz).

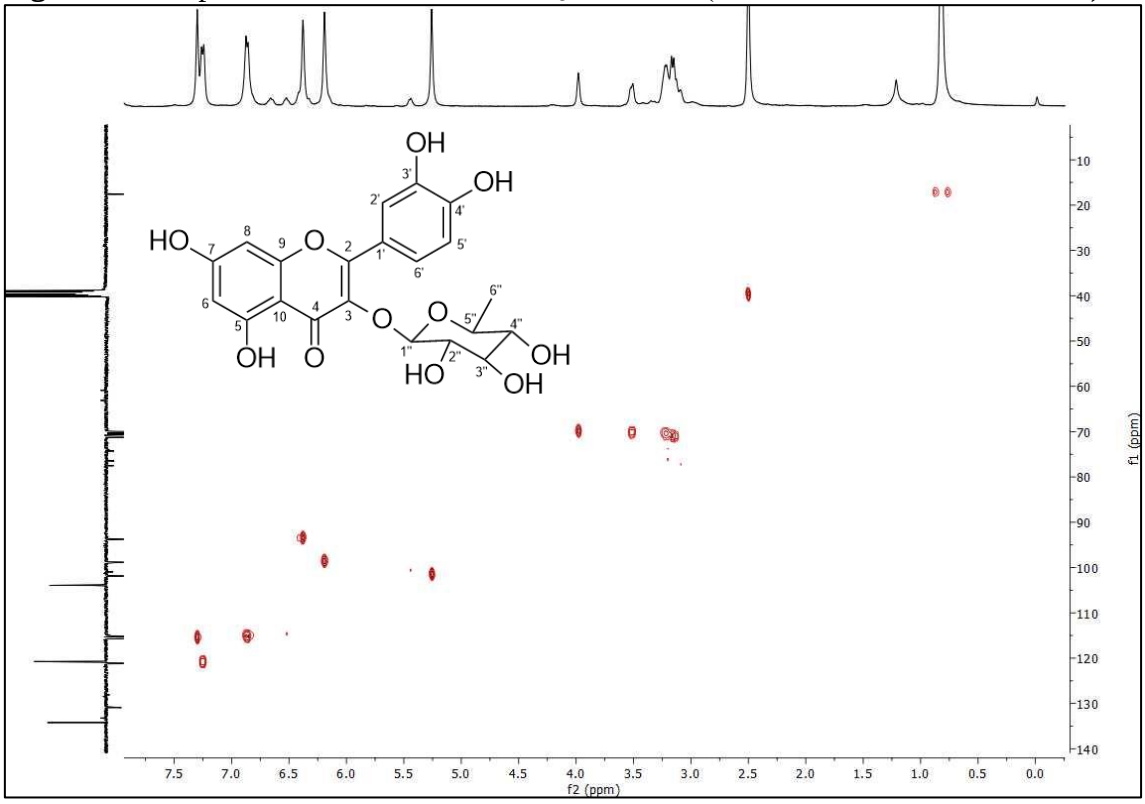
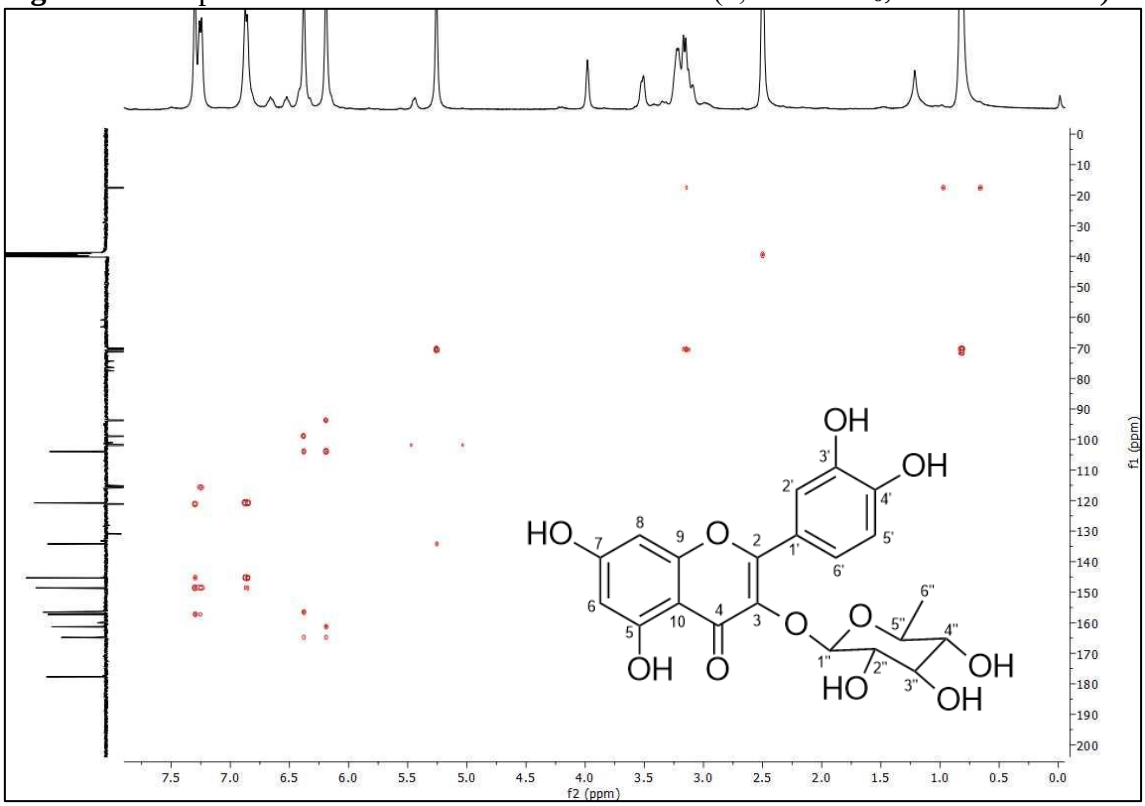


**Figura 176.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HMBC de *Pb*-2 (δ, DMSO-$d_6$, 500 e 125 MHz).




### 5.5.2 Determinação estrutural de *Pb*-3

A substância *Pb*-3 foi obtida como pó amarelado e apresentou fator de retenção (Rf) idêntico ao do padrão tilirosídeo em CCDA, sugerindo que se trata do mesmo composto previamente isolado de *Pavonia cancellata.* Em seu cromatograma, apresenta-se como o terceiro pico com tempo de retenção de 19,718 minutos (Figura 163, pág. 214).

O espectro de RMN $^{1}H$ (500 MHz, $CD_3OD$) (Figura 178, pág. 229) exibiu sinais característicos de flavonoides, com um sistema aromático AA'BB' do anel B, dois hidrogênios meta-acoplados em $\delta_H$ 6,13 ($J$ =2,1 Hz) e $\delta_H$ 6,31 ($J$ =2,2 Hz), atribuídos aos hidrogênios H-6 e H-8 do anel A, além do sinal do próton anomérico da glicose $\delta_H$ 5,24 ($J$ =7,7 Hz) (FERNANDES et al., 2018) (Figura 179 e 180, págs. 229-230).

A análise do espectro evidenciou dois dupletos aromáticos em $\delta_H$ 7,98 ($J$ =6,9 e 2,0 Hz) e 6,82 ($J$ =6,9 e 2,0 Hz) integrando dois hidrogênios cada, atribuídos aos hidrogênios H-2'/H-6' e H-3'/H-5', respectivamente, característicos de um sistema aromático AA'BB' correspondente ao anel B de flavonoides (Figura 179, pág. 229). Foram ainda observados dois dupletos olefínicos *trans* ($J$ =15,8 Hz), indicativos da presença de uma unidade *p*-coumaroil, sugerindo a acilação da molécula (SANTOS-JÚNIOR et al., 2018).

O espectro de RMN $^{13}C$ (125 MHz - APT) exibiu 26 sinais correspondentes a 30 átomos de carbono, destacando-se o sinal em $\delta_C$ 179,43, típico do carbono carbonílico C-4 do anel C de flavonoides. Foram observados ainda sinais de carbonos aromáticos oxigenados em $\delta_C$ 135,17 (C-3), 162,97 (C-5), 165,98 (C-7), 161,52 (C-4') e 161,18 (C-4'''). A unidade glicosídica foi confirmada pelo sinal do carbono anomérico em $\delta_C$ 103,93 e pelos carbonos oximetínicos e oximetilênicos entre δC 64,28 e 78,00. A presença do grupo *p*-coumaroil foi corroborada pelos sinais aromáticos em $\delta_C$ 131,18 (C-2'''/C-6''') e 116,04 (C-3'''/C-5''') (NHUNG et al., 2023) (Figura 181, pág. 230).

A comparação dos dados espectrais de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ com valores previamente reportados (Tabela 37, pág. 227) confirmou que *Pc*-7 corresponde ao canferol-3-*O*-*β*-D-(6''-*E*-*p*-coumaroil)-glicopiranosídeo (tilirosídeo) (Figura 177, pág. 227).

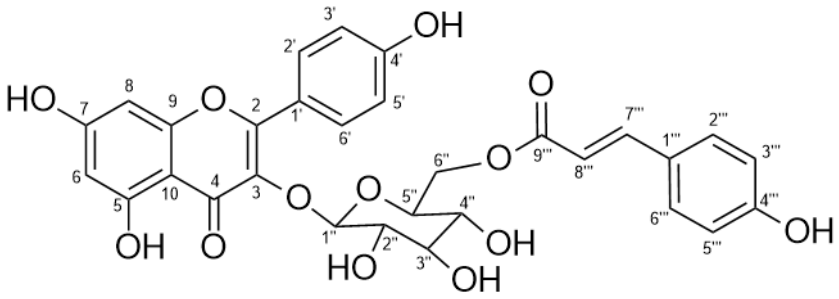


**Figura 177.** Tilirosídeo

**Tabela 37.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pb*-3** (δ, $CD_3OD$, 500 e 125 MHz) com modelos da literatura ***Mo*-1** (δ, $CD_3OD$, 600 e 150 MHz) (NHUNG et al., 2023).

| **C** | ***Pb*-3** | | ***Mo*-1** | |
|---|---|---|---|---|
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **-** | |
| **2** | - | 159,35 | - | 159,20 |
| **3** | - | 135,17 | - | 135,20 |
| **4** | - | 179,43 | - | 179,30 |
| **5** | - | 162,97 | - | 163,50 |
| **6** | 6,13 (d, *J* =2,1 Hz) | 100,00 | 6,15 (sl) | 100,30 |
| **7** | - | 165,98 | - | 166,90 |
| **8** | 6,31 (d, *J* =2,2 Hz) | 94,82 | 6,32 (sl) | 94,90 |
| **9** | - | 158,42 | - | 158,50 |
| **10** | - | 105,59 | - | 105,10 |
| **1'** | - | 122,73 | - | 122,80 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| **2’** | 7,98 (d, *J* =6,9 e 2,0 Hz) | 132,20 | 8,01 (d, *J* =8,4 Hz) | 132,20 |
| **3’** | 6,82 (d, *J* =6,9 e 2,0 Hz) | 116,78 | 6,84 (d, *J* =8,4 Hz) | 116,00 |
| **4’** | - | 161,52 | - | 161,40 |
| **5’** | 6,82 (d, *J* =6,9 e 2,0 Hz) | 116,78 | 6,84 (d, *J* =8,4 Hz) | 116,00 |
| **6’** | 7,98 (d, *J* =6,9 e 2,0 Hz) | 132,20 | 8,01 (d, *J* =8,4 Hz) | 132,20 |
| **1’’** | 5,24 (d, *J* =7,7 Hz) | 103,93 | 5,24 (d, *J* =7,9 Hz) | 104,00 |
| **2’’** | 3,43 - 3,50 (m) | 75,71 | 3,49-3,47 (m) | 75,70 |
| **3’’** | 3,43 - 3,50 (m) | 78,00 | 3,49-3,47 (m) | 78,00 |
| **4’’** | 3,43 - 3,50 (m) | 71,72 | 3,33 (m) | 71,70 |
| **5’’** | 3,43 - 3,50 (m) | 75,80 | 3,49-3,47 (m) | 75,80 |
| **6’’** | 4,30 (dd, *J* =11,9, 2,3 Hz) e 4,19 (dd, *J* =11,9, 6,6 Hz) | 64,28 | 4,32- 4,19 (m) | 64,30 |
| **1’’’** | - | 127,09 | - | 127,10 |
| **2’’’** | 7,30 (d, *J* =8,6 Hz) | 131,18 | 7,33 (d, *J* =9,0 Hz) | 131,20 |
| **3’’’** | 6,79 (d, *J* =6,8 e 1,8 Hz) | 116,04 | 6,82 (d, *J* =8,4 Hz) | 116,80 |
| **4’’’** | - | 161,18 | - | 161,20 |
| **5’’’** | 6,79 (d, *J* =6,8 e 1,8 Hz) | 116,04 | 6,82 (d, *J* =8,4 Hz) | 116,80 |
| **6’’’** | 7,30 (d, *J* =8,6 Hz) | 131,18 | 7,33 (d, *J* =9,0 Hz) | 131,20 |
| **7’’’** | 7,40 (d, *J* =15,9 Hz) | 146,55 | 7,42 (d, *J* =15,6 Hz) | 146,60 |
| **8’’’** | 6,07 (d, *J* =15,9 Hz) | 114,73 | 6,09 (d, *J* =15,6 Hz) | 114,70 |
| **9’’’** | - | 168,78 | - | 168,80 |

**Figura 178.** Espectro de RMN $^{1}H$ de *Pb*-3 (δ, $CD_3OD$, 500 MHz).

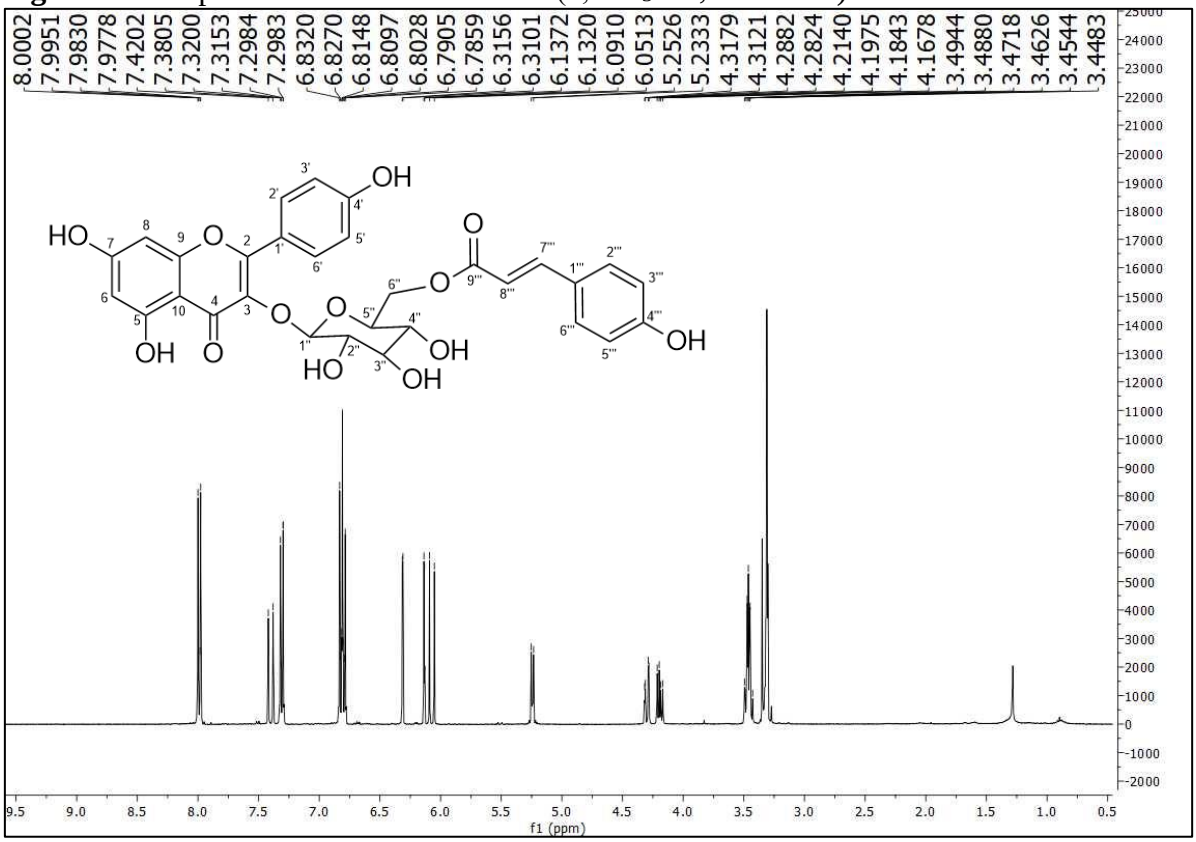



**Figura 179.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pb*-3 (δ, $CD_3OD$, 500 MHz).

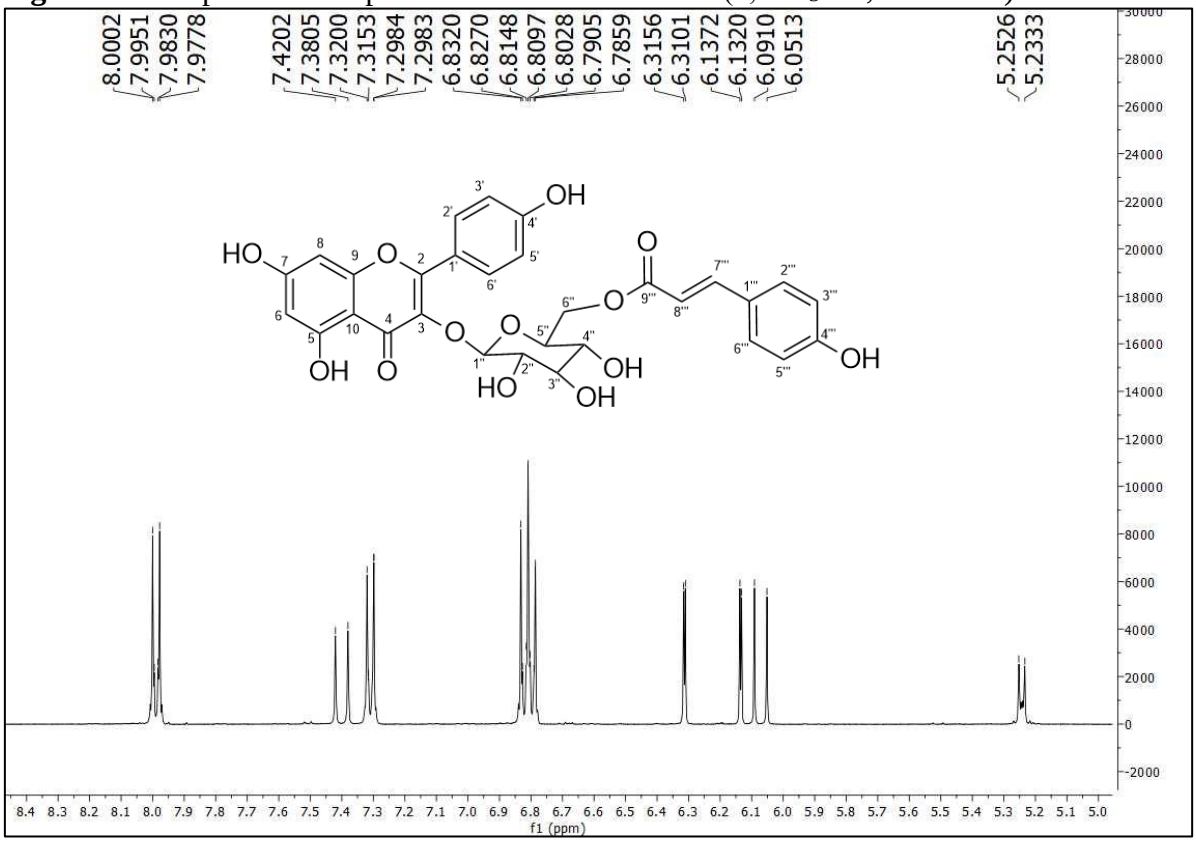


**Figura 180.** Expansão do espectro de RMN $^{1}H$ de *Pb*-3 (δ, $CD_3OD$, 500 MHz).

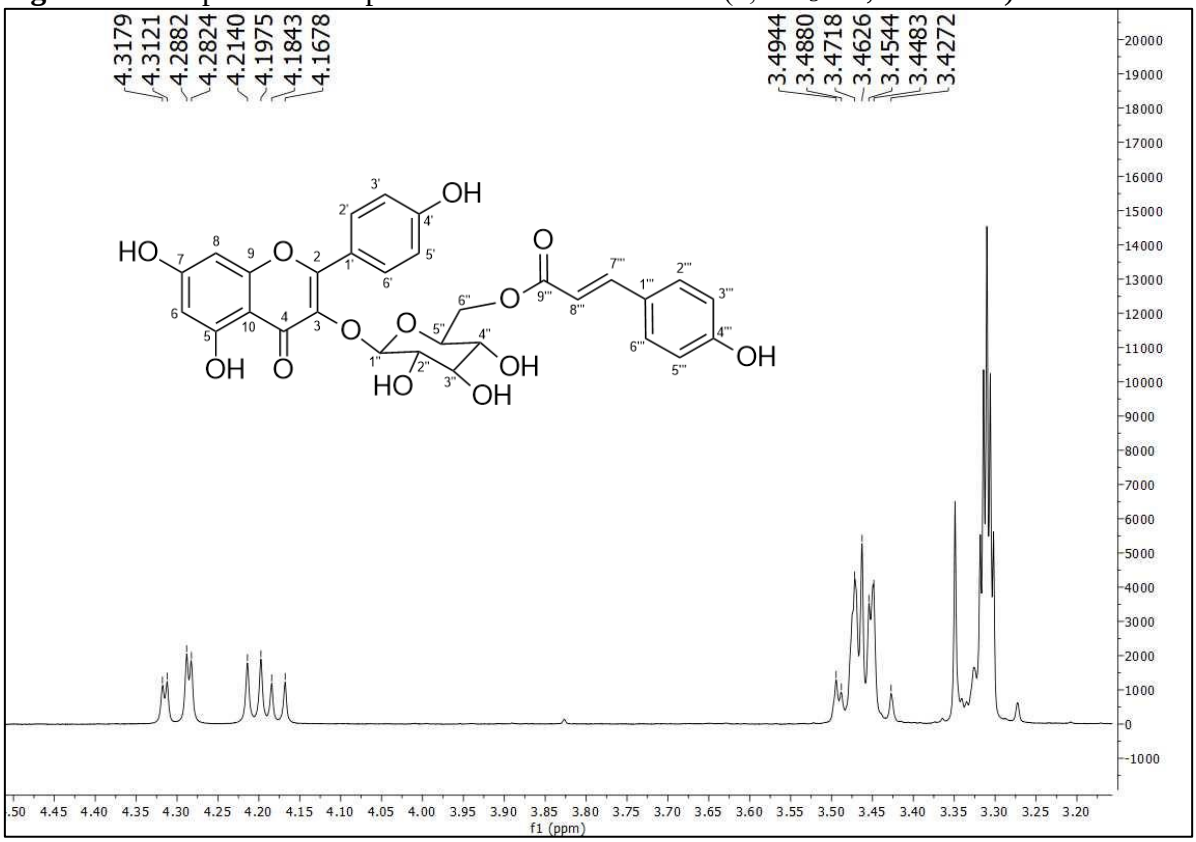
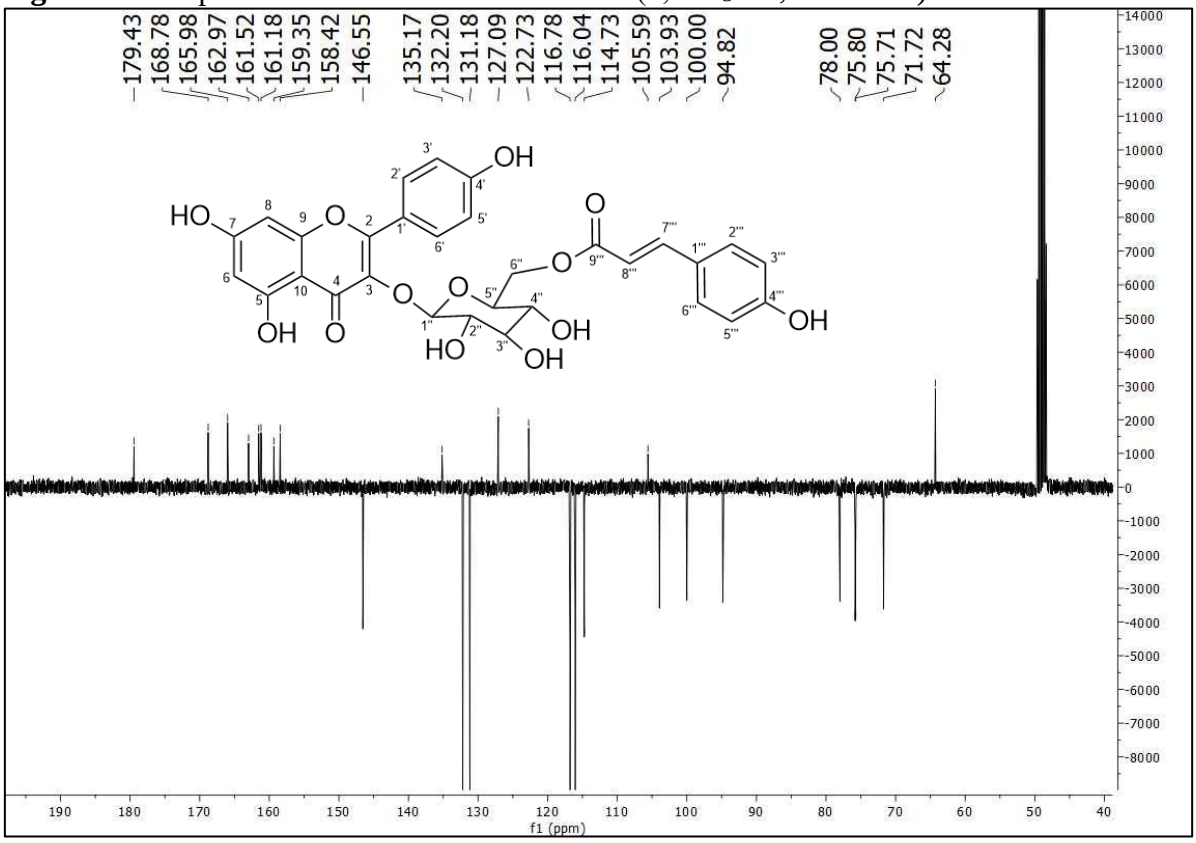



**Figura 181.** Espectro de RMN $^{13}C$-APT de *Pb*-3 (δ, $CD_3OD$, 125 MHz).



### 5.5.3 Determinação estrutural de *Pb*-4a e *Pb*-4b

As substâncias codificadas como *Pb*-4a/4b apresentaram-se ambas na forma de pó amarelado. Em seu cromatograma apresenta-se como o quarto pico com tempo de retenção de 27,718 minutos (Figura 163, pág. 214). Ao analisar seus espectros de RMN $^{1}$H evidenciou-se sinais duplicados de prótons aromáticos e de unidades osídicas.

Os dados espectroscópicos de RMN $^{1}$H (Figura 184, pág. 238) apresentou sinais típicos do esqueleto flavonoídico, com o anel B exibindo um sistema aromático AA'BB', observado como dois dupletos integrando para dois hidrogênios cada, em $\delta_H$ 7,99 ($J$ =8,8 Hz) e 7,95 ($J$ =8,8 Hz) de ambas as moléculas, referentes aos pares de hidrogênios H2'/H-6', e sinais em $\delta_H$ 6,86 ($J$ =8,6 Hz) e 6,84 ($J$ =8,6 Hz) referentes aos pares de hidrogênios H-3'/H-5' (DEVI & KUMAR, 2020) (Figura 185, pág. 238).

Os hidrogênios do anel A apareceram como dois dupletos meta-acoplados atribuídos a H-6 e H-8, com deslocamentos químicos reportados entre $\delta_H$ 6,15 (d, $J$ =2,0 Hz, 1H) e 6,19 (d, $J$ =2,0 Hz, 1H) para o hidrogênio H-6 de ambas as substâncias e deslocamentos em $\delta_H$ 6,37 (d, $J$ =2,0 Hz, 1H) e 6,35 (d, $J$ =1,9 Hz, 1H), para o hidrogênio H-8 de ambas as substâncias (ŞENER et al., 2024) (Figura 185, pág. 238).

A presença da unidade glicosídica é confirmada pelo sinal do próton anomérico em $\delta_H$ 5,44 (d, $J$ =5,9 Hz, 1H) de *Pb*-4a, e em $\delta_H$ 5,40 (d, $J$ =7,4 Hz, 1H) para *Pb*-4b, além dos sinais dos hidrogênios oximetínicos e oximetilênicos da glicose distribuídos entre $\delta_H$ 3,12 e 4,28 ppm (Figura 186, pág. 239). Diante dos valores atribuídos ao núcleo flavonoídico junto com a unidade osídica, sinais foram evidenciados para outro sistema AA'BB', típico de grupos *p*-coumaroil, como em *Pb*-3 (ALBUQUERQUE et al., 2025).

Desta maneira, foi levantado a sugestão de que poderia se tratar de uma mistura da substância tilirosídeo em suas duas configurações (*trans* e *cis*). Para o *trans*-tilirosídeo, a literatura descreve dois dupletos bem definidos entre $\delta_H$ 6,00-6,30 e $\delta_H$ 7,40-7,70, com constantes de acoplamento elevadas, geralmente entre $J$ =15,0 e 16,0 Hz, específicas de uma dupla ligação em configuração *trans* (SANTOS-JÚNIOR et al., 2018).

Em contrapartida, no *cis*-tilirosídeo, esses hidrogênios olefínicos aparecem deslocados em regiões próximas, porém exibem constantes de acoplamento significativamente menores, tipicamente na faixa de $J$ =11,0 a 13,0 Hz, constituindo o principal critério espectroscópico para a diferenciação entre os dois isômeros por RMN $^{1}$H (BERTELLA et al., 2024). Assim foram evidenciados sinais em $\delta_H$ 7,34 (d, $J$ =15,8 Hz, 1H) e $\delta_H$ 6,11 (d, $J$ =15,9 Hz, 1H) para o *trans*-tilirosídeo e $\delta_H$ 6,67 (d, $J$ =12,7 Hz,

1H) e $\delta_H$ 5,46 (d, *J* =12,7 Hz, 1H) para o *cis*-tilirosídeo, referentes aos hidrogênios H-7’’’ e H-8’’’, respectivamente (DEVI & KUMAR, 2020) (Figura 185, pág. 238).

Os espectros de RMN $^{13}$C de *cis*- e *trans*-tilirosídeo mostram elevada similaridade, o que afeta a cadeia cinâmica do grupo *p*-coumaroil. O carbono carbonílico C-4 do anel C do flavonoide é reportado em $\delta_C$ 177,81 e 177,77 em *Pb*-4a e *Pb*-4b, respectivamente. Sinais para carbonos oxigenados do núcleo canferol apareceram em $\delta_C$ 133,51 e 133,48 (C-3), $\delta_C$ 161,67 e 161,59 (C-5), $\delta_C$ 165,06 para ambos os carbonos C-7 e $\delta_C$ 160,48 e 160,45 (C-4’) (CORRÊA et al., 2018) (Figuras 189 e 190, págs. 241-242).

O carbono anomérico da glicose foi observado em $\delta_C$ 101,51 e 101,49, além da presença dos carbonos oximetilênicos da unidade osídica em $\delta_C$ 63,43 e 63,15, dos flavonoides *trans*-tilirosídeo e *cis*-tilirosídeo, respectivemente. Para os carbonos da dupla ligação do sistema *p*-coumaroil C-7’’’ e C-8’’’foram vistos deslocamentos químicos em $\delta_C$ 145,07 e 114,08 ppm para *Pb*-4a e $\delta_C$ 144,16 e 115,05 para *Pb*-4b (Figura 191, pág. 241). As diferenças mais notáveis entre os isômeros *cis* e *trans* concentram-se nestes carbonos olefínicos da cadeia *p*-coumaroil, que podem apresentar variações de até aproximadamente 1-2 ppm, sendo o isômero *trans* frequentemente descrito como ligeiramente mais desprotegido, em função da maior conjugação eletrônica associada à configuração *trans* (ŞENER et al., 2024).

Os experimentos bidimensionais relatados na literatura corroboram essas atribuições estruturais. No espectro HSQC, observam-se correlações entre os hidrogênios olefínicos e seus respectivos carbonos sp², bem como entre o próton anomérico e o carbono anomérico da glicose, o que confirma a unidade osídica (Figura 192, pág. 242). O espectro HMBC mostrou correlações entre os hidrogênios H-6’’ da glicose e o carbono carbonílico do grupo *p*-coumaroil, além de correlações entre os hidrogênios olefínicos e o carbono carbonílico da cadeia cinâmica, que mantém a configuração geométrica do substituinte *p*-coumaroil (FERNANDES et al., 2018) (Figura 193, pág. 242).

Dessa forma, a análise conjunta dos dados de RMN de $^{1}$H, $^{13}$C e dos espectros bidimensionais (Tabelas 38 e 39, págs. 234, 236) permitiu a caracterização dos isômeros *cis*- e *trans*-tilirosídeo (Figuras 182 e 183, pág. 233). Estes compostos foram previamente isolados de diversas espécies de Malvaceae, incluindo *Pavonia*, destacando também as atividades biológicas, que tanto o *cis* quanto o *trans*-tilirosídeo exibem propriedades antioxidantes, anti-inflamatórias, hepatoprotetoras e efeitos antidiabéticos, sugerindo grande potencial farmacológico (BERTELLA et al., 2024; GOTO et al., 2012).

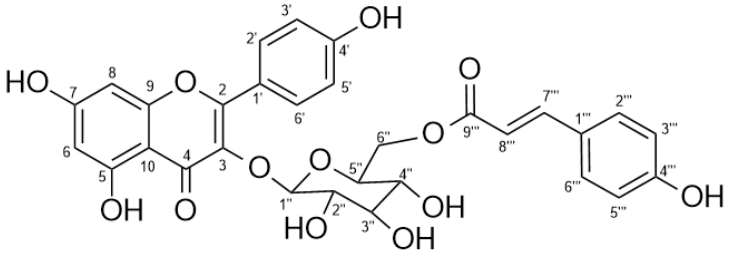


**Figura 182**. *Trans*-tilirosídeo

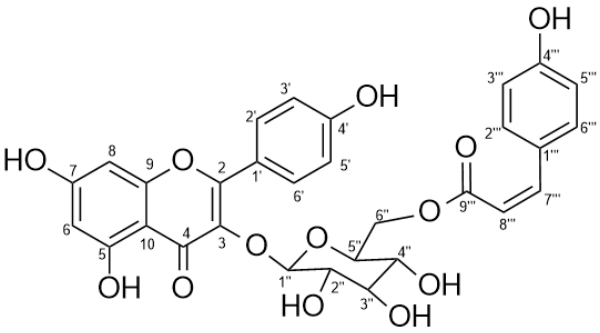


**Figura 183.** *Cis*-tilirosídeo

**Tabela 38.** Dados comparativos de RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ de ***Pb*-4a** e ***Pb*-4b** (δ, DMSO-$d_6$, 500 e 125 MHz) com modelos da literatura ***Mo*-1** (δ, DMSO-$d_6$, 500 e 125 MHz) (SANTOS-JÚNIOR et al., 2018).

| C | ***Pb*-4a** | | ***Pb*-4b** | | ***Mo*-1** | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | | | ***Trans*-Tilirosídeo** | | ***Cis*-Tilirosídeo** | |
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** |
| **2** | - | 156,98 | - | 156,88 | - | 156,40 | - | 156,30 |
| **3** | - | 133,51 | - | 133,48 | - | 133,00 | - | 132,90 |
| **4** | - | 177,81 | - | 177,77 | - | 177,30 | - | 177,10 |
| **5** | - | 161,67 | - | 161,59 | - | 161,10 | - | 161,10 |
| **6** | 6,15 (d, *J* =2,0 Hz, 1H) | 99,34 | 6,19 (d, *J* =2,0 Hz, 1H) | 99,26 | 6,15 (*d*, *J* =2,0 Hz) | 98,70 | 6,16 (*brs*) | 98,90 |
| **7** | - | 165,06 | - | 165,06 | - | 164,20 | - | 165,40 |
| **8** | 6,37 (d, *J* =2,0 Hz, 1H) | 94,20 | 6,35 (d, *J* =1,9 Hz, 1H) | 94,19 | 6,38 (*d*, *J* =2,0 Hz) | 93,60 | 6,32 (*brs*) | 93,70 |
| **9** | - | 156,85 | - | 156,85 | - | 156,30 | - | 156,40 |
| **10** | - | 104,26 | - | 104,18 | - | 103,80 | - | 103,50 |
| **1'** | - | 121,22 | - | 121,22 | - | 120,70 | - | 120,70 |
| **2'** | 7,99 (d, *J* =8,8 Hz, 1H) | 131,26 | 7,95 (d, *J* =8,8 Hz, 1H) | 131,24 | 7,98 (*d*, *J* =9,0 Hz) | 130,70 | 7,95 (*d*, *J* =9,0 Hz) | 130,70 |
| **3'** | 6,86 (d, *J* =8,6 Hz, 2H) | 115,24 | 6,84 (d, *J* =8,6 Hz, 2H) | 115,53 | 6,85 (*d*, *J* =9,0 Hz) | 115,00 | 6,84 (*d*, *J* =9,0 Hz) | 115,00 |
| **4'** | - | 160,48 | - | 160,45 | - | 159,90 | - | 159,90 |
| **5'** | 6,86 (d, *J* =8,6 Hz, 2H) | 115,24 | 6,84 (d, *J* =8,6 Hz, 2H) | 115,53 | 6,85 (*d*, *J* =9,0 Hz) | 115,00 | 6,84 (*d*, *J* =9,0 Hz) | 115,00 |
| **6'** | 7,99 (d, *J* =8,8 Hz, 1H) | 131,26 | 7,95 (d, *J* =8,8 Hz, 1H) | 131,24 | 7,98 (*d*, *J* =9,0 Hz) | 130,70 | 7,95 (*d*, *J* =9,0 Hz) | 130,70 |

| | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| **1’’** | 5,44 (d, *J* =5,9 Hz, 1H) | 101,51 | 5,40 (d, *J* =7,4 Hz, 1H) | 101,49 | 5,43 (*d*, *J* =7,5 Hz) | 101,00 | 5,40 (*d*, *J* =8,0 Hz) | 101,10 |
| **2’’** | 3,31-3,22 (m, 1H) | 74,57 | 3,31-3,22 (m, 1H) | 74,59 | 3,29-3,23 (*m*) | 74,01 | 3,22 (*dd*, *J* =8,0/8,5 Hz) | 74,10 |
| **3’’** | 3,31-3,22 (m, 1H) | 76,70 | 3,31-3,22 (m, 1H) | 76,70 | 3,29-3,23 (*m*) | 76,20 | 3,27 (*dd*, *J* =8,5/8,5 Hz) | 76,20 |
| **4’’** | 3,22-3,12 (m, 1H) | 70,44 | 3,22-3,12 (m, 1H) | 70,44 | 3,17 (*m*) | 69,90 | 3,16 (*dd*, *J* =8,5/9,5 Hz) | 69,90 |
| **5’’** | 3,36 (ddd, *J* =8,6; 6,4; 3,2 Hz, 1H) | 74,69 | 3,36 (ddd, *J* =8,6; 6,4; 3,2 Hz, 1H) | 74,42 | 3,39 (*ddd*, *J* =2,0/6,5/9,5 Hz) | 74,20 | 3,37 (*ddd*, *J* =2,0/6,5/9,5 Hz) | 73,90 |
| **6’’** | 4,28 (dd, *J* =12,0; 2,1 Hz, 1H) e 4,03 (dd, *J* =11,8; 6,3 Hz, 1H) | 63,43 | 4,16 (dd, *J* =11,9; 2,3 Hz, 1H) e 4,08 (dd, *J* =11,9, 6,1 Hz, 1H) | 63,15 | 4,28 (*dd*, *J* =2,0/12,0 Hz; H-6’’α) e 4,03 (*dd*, *J* =6,5/12,0 Hz; H-6’’β) | 62,90 | 4,18 (*dd*, *J* =2,0/12,0 Hz; H-6’’α) e 4,08 (*dd*, *J* =6,5/12,0 Hz; H-6’’β) | 62,60 |
| **1’’’** | - | 125,75 | - | 125,35 | - | 124,90 | - | 125,20 |
| **2’’’** | 7,36 (d, *J* =8,5 Hz, 1H) | 130,60 | 7,54 (d, *J* =8,6 Hz, 1H) | 133,07 | 7,36 (*d*, *J* =8,5 Hz) | 130,10 | 7,55 (*d*, *J* =9,0 Hz) | 132,50 |
| **3’’’** | 6,79 (d, *J* =8,4 Hz, 1H) | 116,24 | 6,70 (d, *J* =8,4 Hz, 2H) | 115,56 | 6,78 (*d*, *J* =8,5 Hz) | 115,70 | 6,71 (*d*, *J* =9,0 Hz) | 114,70 |
| **4’’’** | - | 160,30 | - | 159,27 | - | 159,70 | - | 158,80 |
| **5’’’** | 6,79 (d, *J* =8,4 Hz, 1H) | 116,24 | 6,70 (d, *J* =8,4 Hz, 2H) | 115,56 | 6,78 (*d*, *J* =8,5 Hz) | 115,70 | 6,71 (*d*, *J* =9,0 Hz) | 114,70 |
| **6’’’** | 7,36 (d, *J* =8,5 Hz, 1H) | 130,60 | 7,54 (d, *J* =8,6 Hz, 1H) | 133,07 | 7,36 (*d*, *J* =8,5 Hz) | 130,10 | 7,55 (*d*, *J* =9,0 Hz) | 132,50 |
| **7’’’** | 7,34 (d, *J* =15,8 Hz, 1H) | 145,07 | 6,67 (d, *J* =12,7 Hz, 1H) | 144,16 | 7,34 (*d*, *J* =16,0 Hz) | 144,50 | 6,69 (*d*, *J* =12,5 Hz) | 143,60 |
| **8’’’** | 6,11 (d, *J* =15,9 Hz, 1H) | 114,08 | 5,46 (d, *J* =12,7 Hz, | 115,05 | 6,10 (*d*, *J* =16,0 Hz) | 113,60 | 5,48 (*d*, *J* =12,5 Hz) | 114,50 |

| | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | 1H) | | | | | |
| **9’’’** | - | 166,64 | - | 165,84 | - | 166,10 | - | 165,30 |

**Tabela 39.** Dados espectrais de HSQC e HMBC de ***Pb*-4a e 4b** (δ, DMSO-$d_6$, 500 e 125 MHz).

| **C** | ***Pb*-4a** | | | | ***Pb*-4b** | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | **HSQC** | | **HMBC** | | **HSQC** | | **HMBC** | |
| | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$^2J$** | **$^3J$** | **$\delta_H$** | **$\delta_C$** | **$^2J$** | **$^3J$** |
| **2** | - | 156,98 | - | - | - | 156,88 | - | - |
| **3** | - | 133,51 | - | - | - | 133,48 | - | - |
| **4** | - | 177,81 | - | - | - | 177,77 | - | - |
| **5** | - | 161,67 | - | - | - | 161,59 | - | - |
| **6** | 6,15 (d, *J* =2,0 Hz, 1H) | 99,34 | C-5; C-7 | C-8; C-10 | 6,19 (d, *J* =2,0 Hz, 1H) | 99,26 | C-5; C-7 | C-8; C-10 |
| **7** | - | 165,06 | - | | - | 165,06 | - | - |
| **8** | 6,37 (d, *J* =2,0 Hz, 1H) | 94,20 | C-7 | C-6; C-10 | 6,35 (d, *J* =1,9 Hz, 1H) | 94,19 | C-7 | C-6; C-10 |
| **9** | - | 156,85 | - | - | - | 156,85 | - | - |
| **10** | - | 104,26 | - | - | - | 104,18 | - | - |
| **1’** | - | 121,22 | - | - | - | 121,22 | - | - |
| **2’** | 7,99 (d, *J* =8,8 Hz, 1H) | 131,26 | - | C-2; C-4’ | 7,95 (d, *J* =8,8 Hz, 1H) | 131,24 | - | C-2; C-4’ |
| **3’** | 6,86 (d, *J* =8,6 Hz, 2H) | 115,24 | C-4’ | C-1’ | 6,84 (d, *J* =8,6 Hz, 2H) | 115,53 | - | - |
| **4’** | - | 160,48 | - | - | - | 160,45 | - | - |

| | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| **5’** | 6,86 (d, *J* =8,6 Hz, 2H) | 115,24 | C-4’ | C-1’ | 6,84 (d, *J* =8,6 Hz, 2H) | 115,53 | - | - |
| **6’** | 7,99 (d, *J* =8,8 Hz, 1H) | 131,26 | - | C-2; C-4’ | 7,95 (d, *J* =8,8 Hz, 1H) | 131,24 | - | C-2; C-4’ |
| **1’’** | 5,44 (d, *J* =5,9 Hz, 1H) | 101,51 | - | C-3 | 5,40 (d, *J* =7,4 Hz, 1H) | 101,49 | - | C-3 |
| **2’’** | 3,31-3,22 (m, 1H) | 74,57 | - | - | 3,31-3,22 (m, 1H) | 74,59 | - | - |
| **3’’** | 3,31-3,22 (m, 1H) | 76,70 | - | - | 3,31-3,22 (m, 1H) | 76,70 | - | - |
| **4’’** | 3,22-3,12 (m, 1H) | 70,44 | C-3’’ | - | 3,22-3,12 (m, 1H) | 70,44 | - | - |
| **5’’** | 3,36 (ddd, *J* =8,6; 6,4; 3,2 Hz, 1H) | 74,69 | - | - | 3,36 (ddd, *J* =8,6; 6,4; 3,2 Hz, 1H) | 74,42 | - | - |
| **6’’** | 4,28 (dd, *J* =12,0; 2,1 Hz, 1H) e 4,03 (dd, *J* =11,8; 6,3 Hz, 1H) | 63,43 | - | C-4’’’; C-9’’’ | 4,16 (dd, *J* =11,9; 2,3 Hz, 1H) e 4,08 (dd, *J* =11,9, 6,1 Hz, 1H) | 63,15 | - | C-9’’’ |
| **1’’’** | - | 125,75 | - | - | - | 125,35 | - | - |
| **2’’’** | 7,36 (d, *J* =8,5 Hz, 1H) | 130,60 | - | C-7’’’ | 7,54 (d, *J* =8,6 Hz, 1H) | 133,07 | - | C-4’’’ |
| **3’’’** | 6,79 (d, *J* =8,4 Hz, 1H) | 116,24 | C-2’’’; C-4’’’ | C-1’’’ | 6,70 (d, *J* =8,4 Hz, 2H) | 115,56 | C-4’’’ | C-1’’’ |
| **4’’’** | - | 160,30 | - | - | - | 159,27 | - | - |
| **5’’’** | 6,79 (d, *J* =8,4 Hz, 1H) | 116,24 | C-2’’’; C-4’’’ | C-1’’’ | 6,70 (d, *J* =8,4 Hz, 2H) | 115,56 | C-4’’’ | C-1’’’ |
| **6’’’** | 7,36 (d, *J* =8,5 Hz, 1H) | 130,60 | - | C-7’’’ | 7,54 (d, *J* =8,6 Hz, 1H) | 133,07 | - | C-4’’’ |
| **7’’’** | 7,34 (d, *J* =15,8 Hz, 1H) | 145,07 | C-8’’’ | C-9’’’ | 6,67 (d, *J* =12,7 Hz, 1H) | 144,16 | - | C-2’’’; C-9’’’ |
| **8’’’** | 6,11 (d, *J* =15,9 Hz, 1H) | 114,08 | - | - | 5,46 (d, *J* =12,7 Hz, 1H) | 115,05 | - | - |
| **9’’’** | - | 166,64 | - | - | - | 165,84 | - | - |

**Figura 184.** Espectro de RMN $^{1}$H de *Pb*-4 (δ, DMSO-$d_6$, 500 MHz).

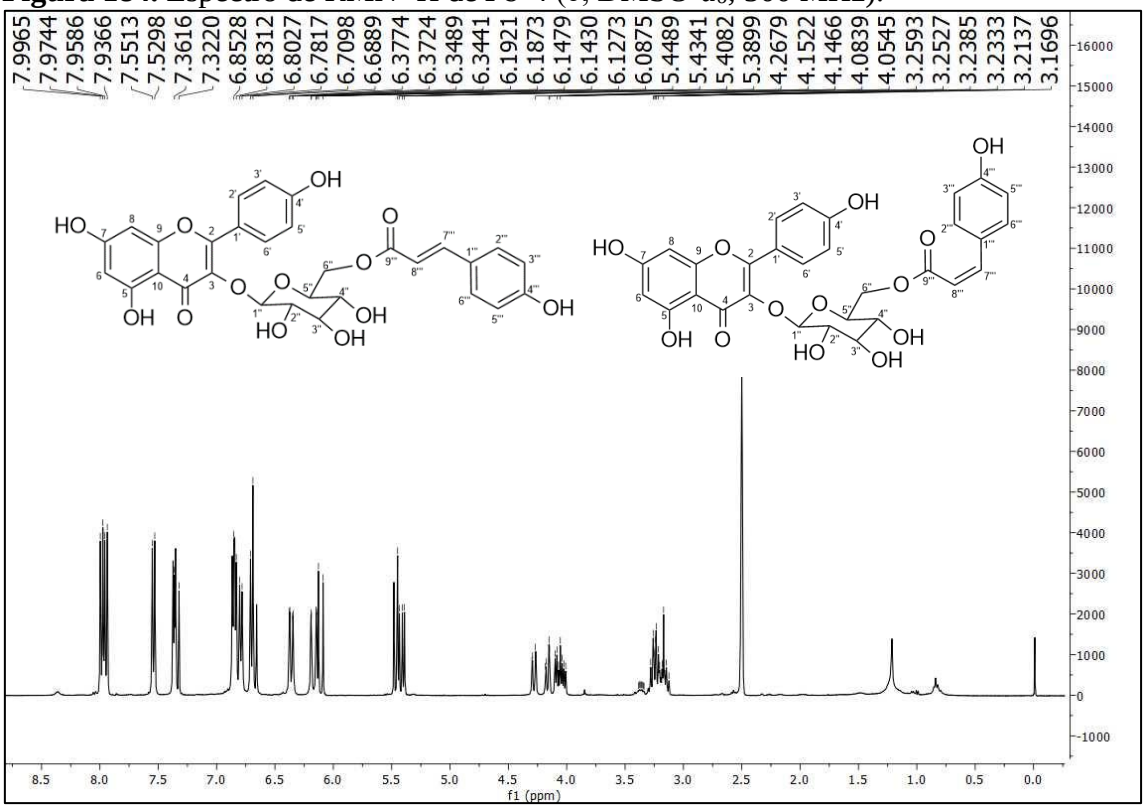



**Figura 185.** Expansão do espectro de RMN $^{1}$H de *Pb*-4 (δ, DMSO-$d_6$, 500 MHz).

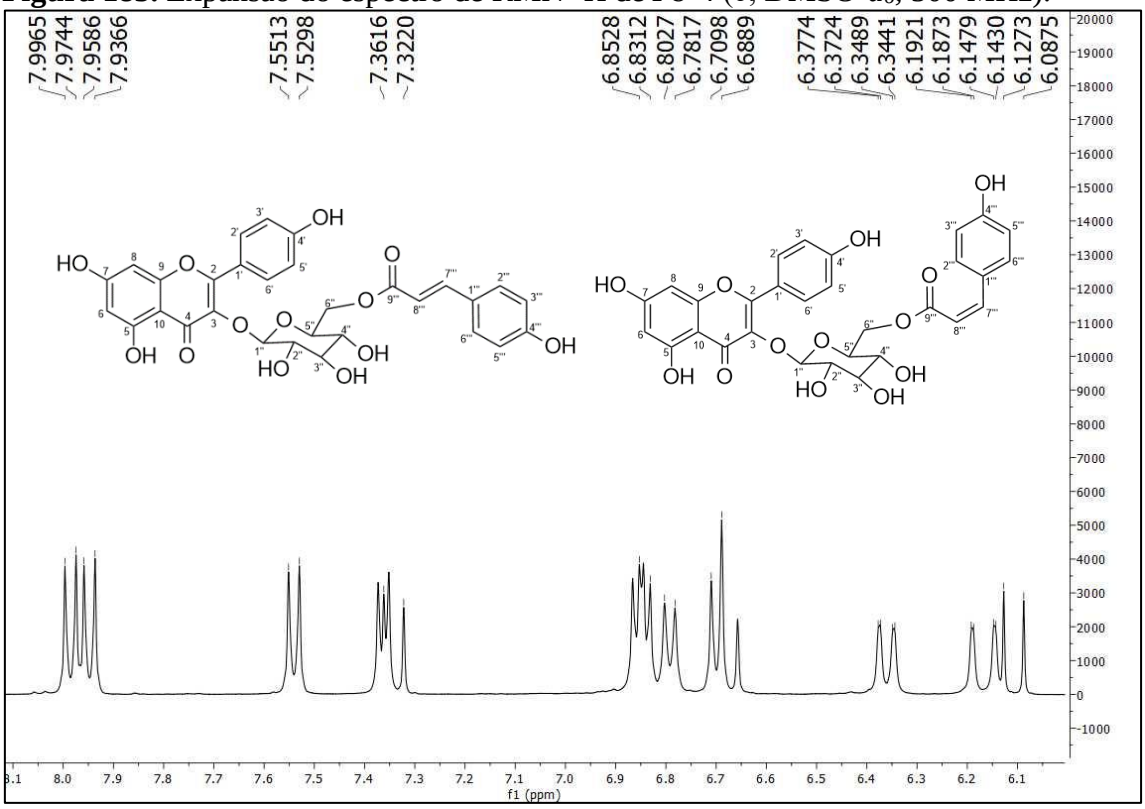


**Figura 186.** Expansão do espectro de RMN $^{1}$H de *Pb*-4 (δ, DMSO-$d_6$, 500 MHz).

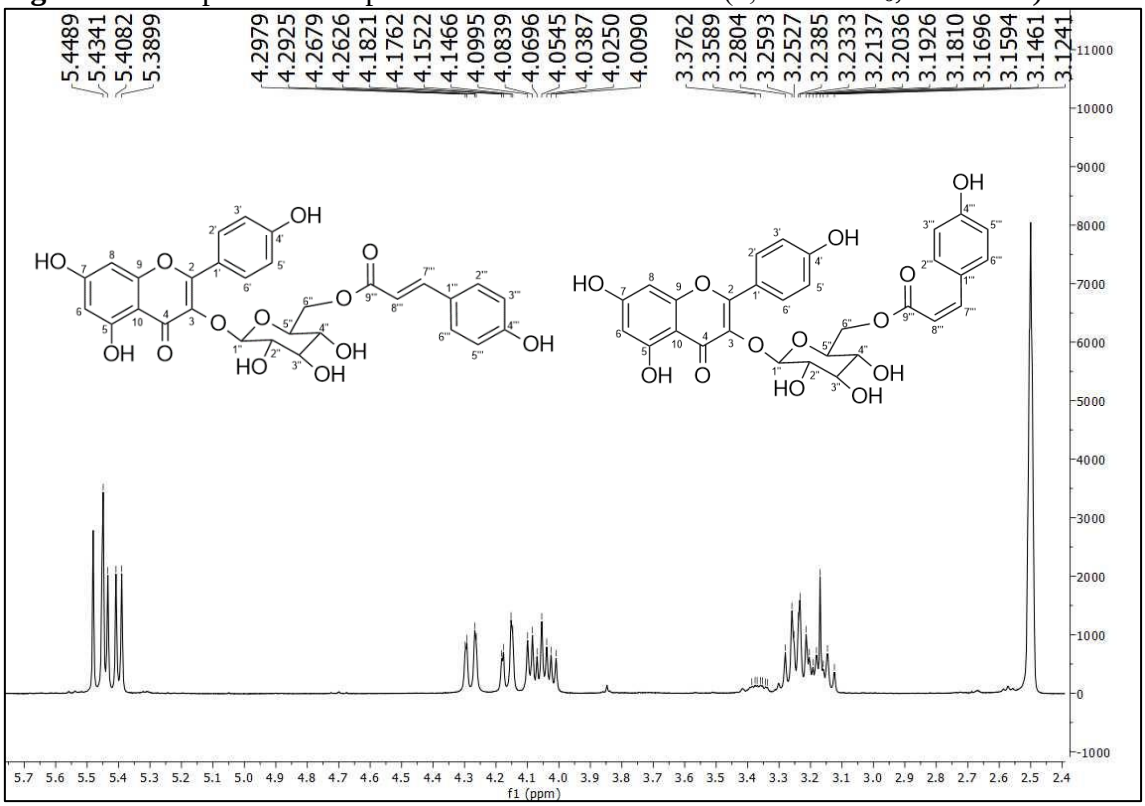



**Figura 187.** Espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pb*-4 (δ, DMSO-$d_6$, 125 MHz).

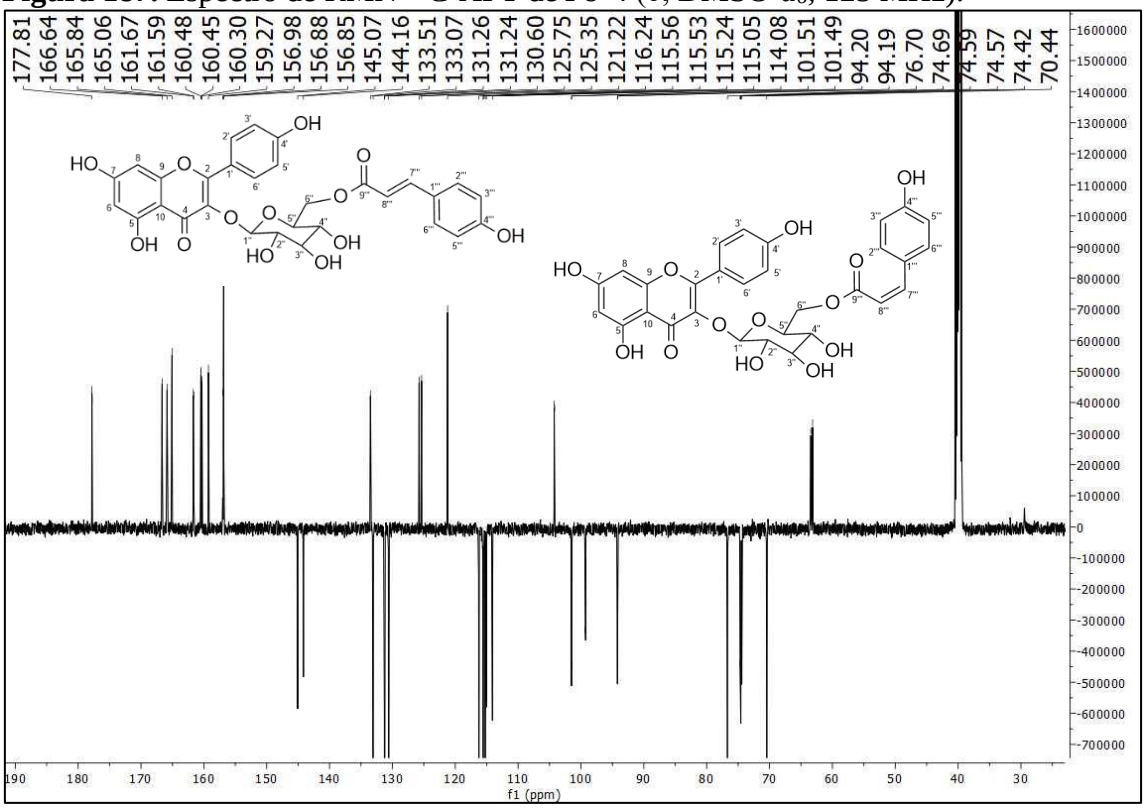


**Figura 188.** Expansão do espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pb*-4 (δ, DMSO-$d_6$, 125 MHz).

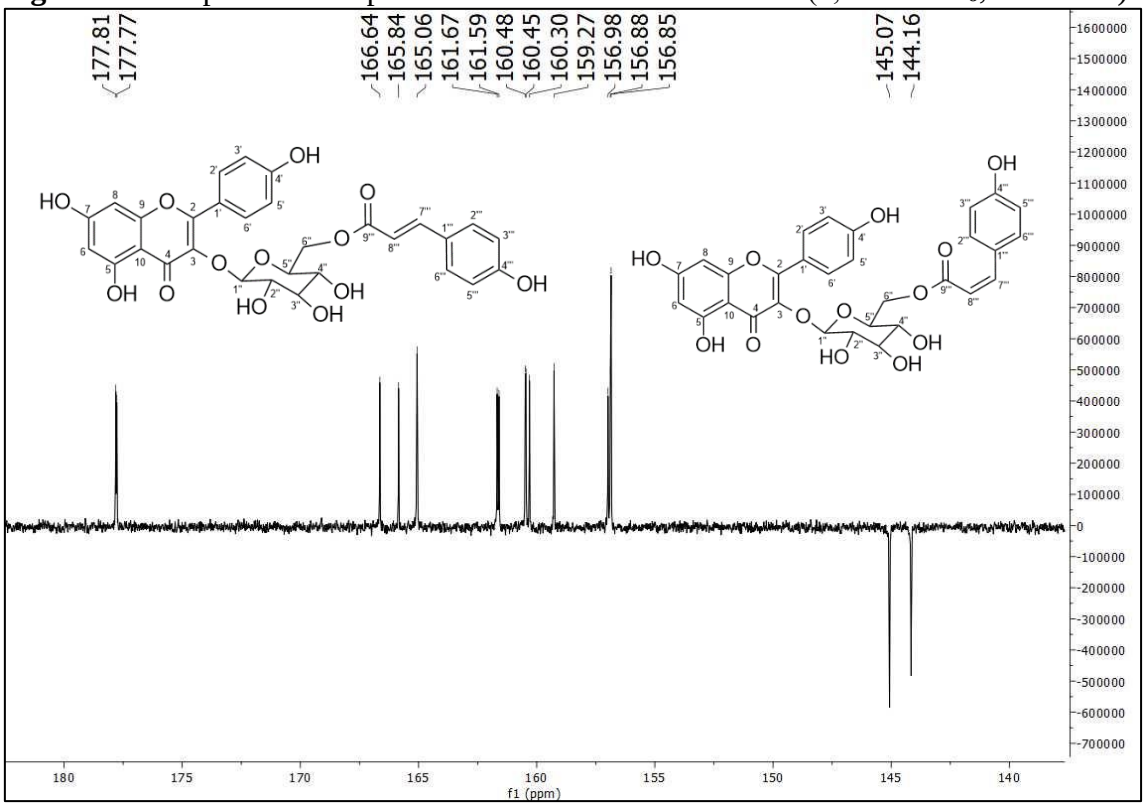



**Figura 189.** Expansão do espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pb*-4 (δ, DMSO-$d_6$, 125 MHz).

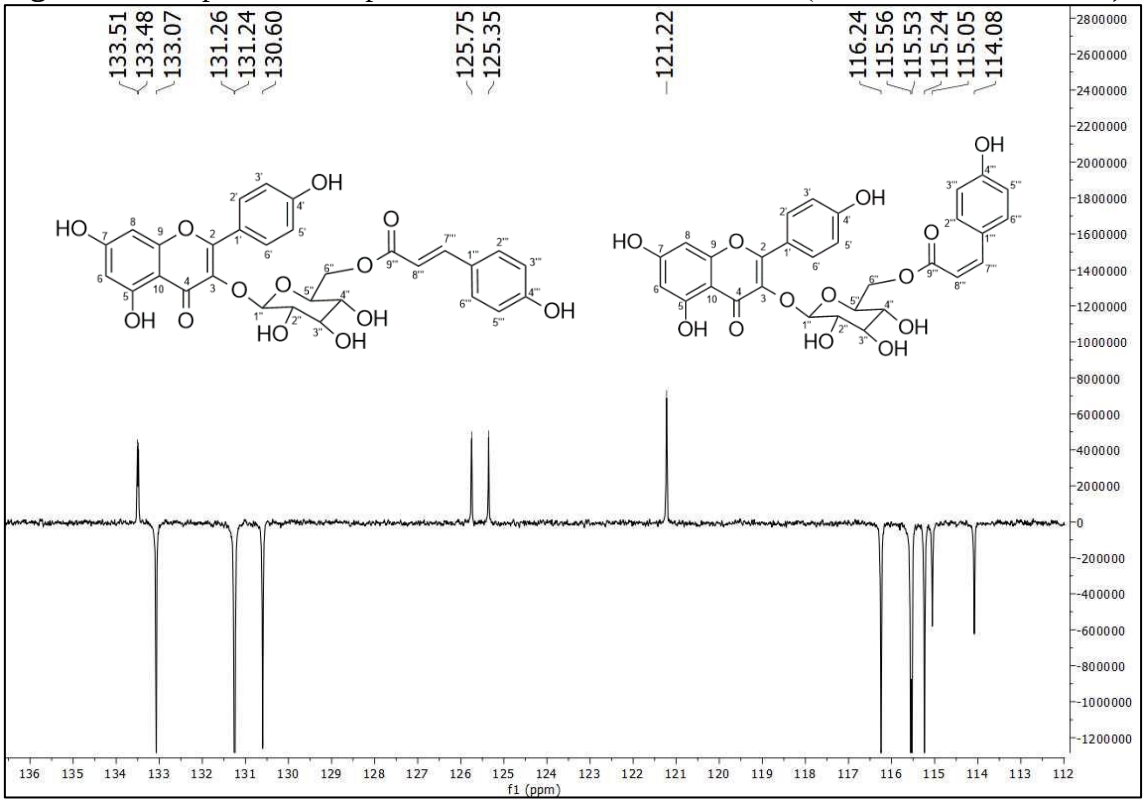


**Figura 190.** Expansão do espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pb*-4 (δ, DMSO-$d_6$, 125 MHz).

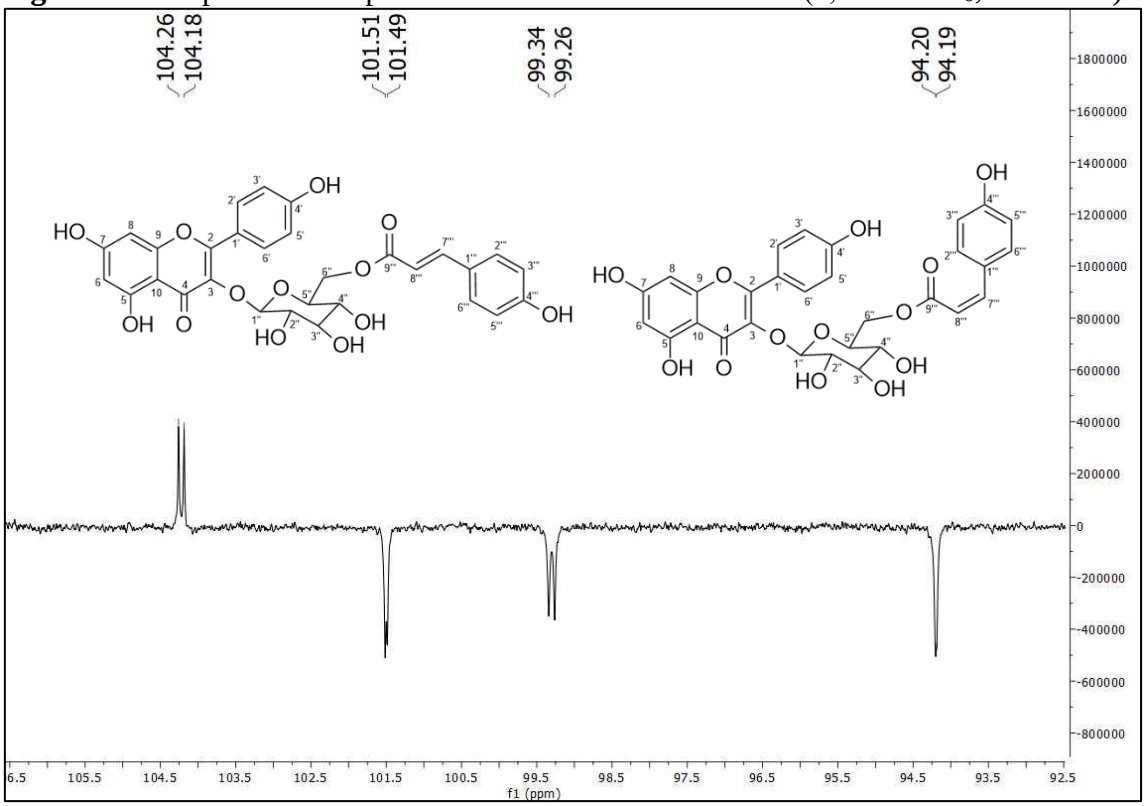



**Figura 191.** Expansão do espectro de RMN $^{13}$C-APT de *Pb*-4 (δ, DMSO-$d_6$, 125 MHz).

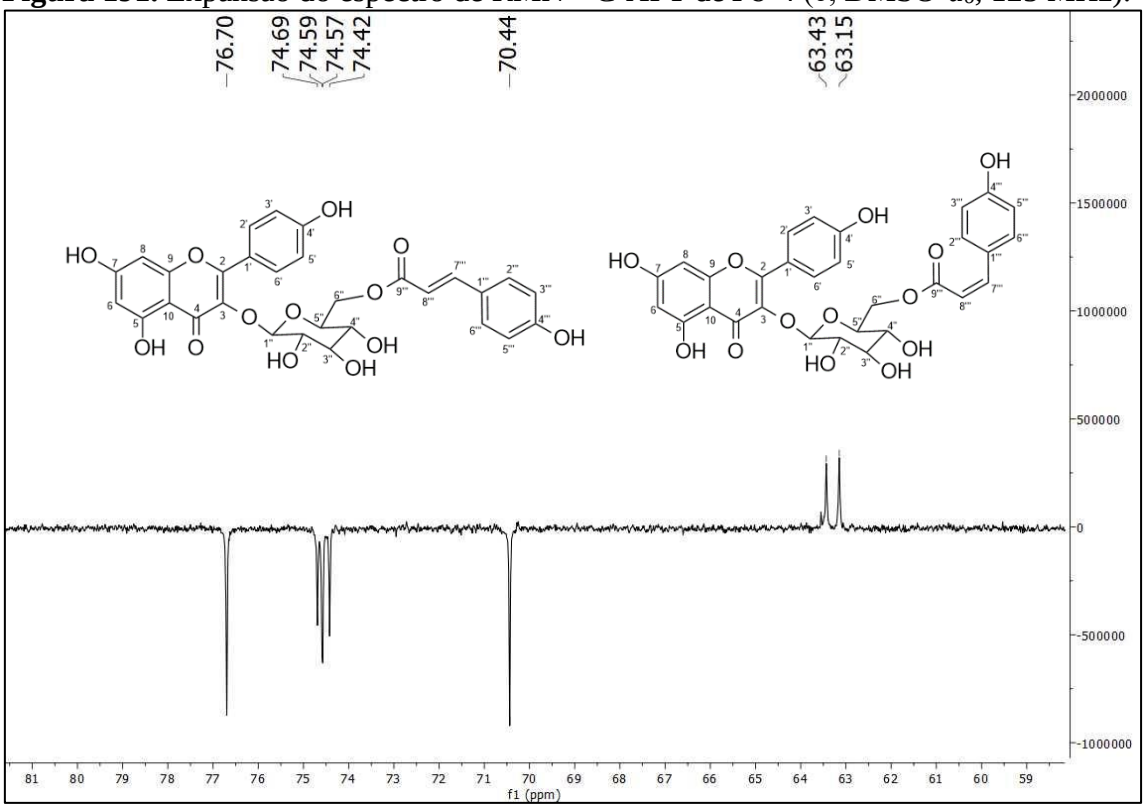


**Figura 192.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HSQC de *Pb*-4 (δ, DMSO-$d_6$, 500 e 125 MHz).

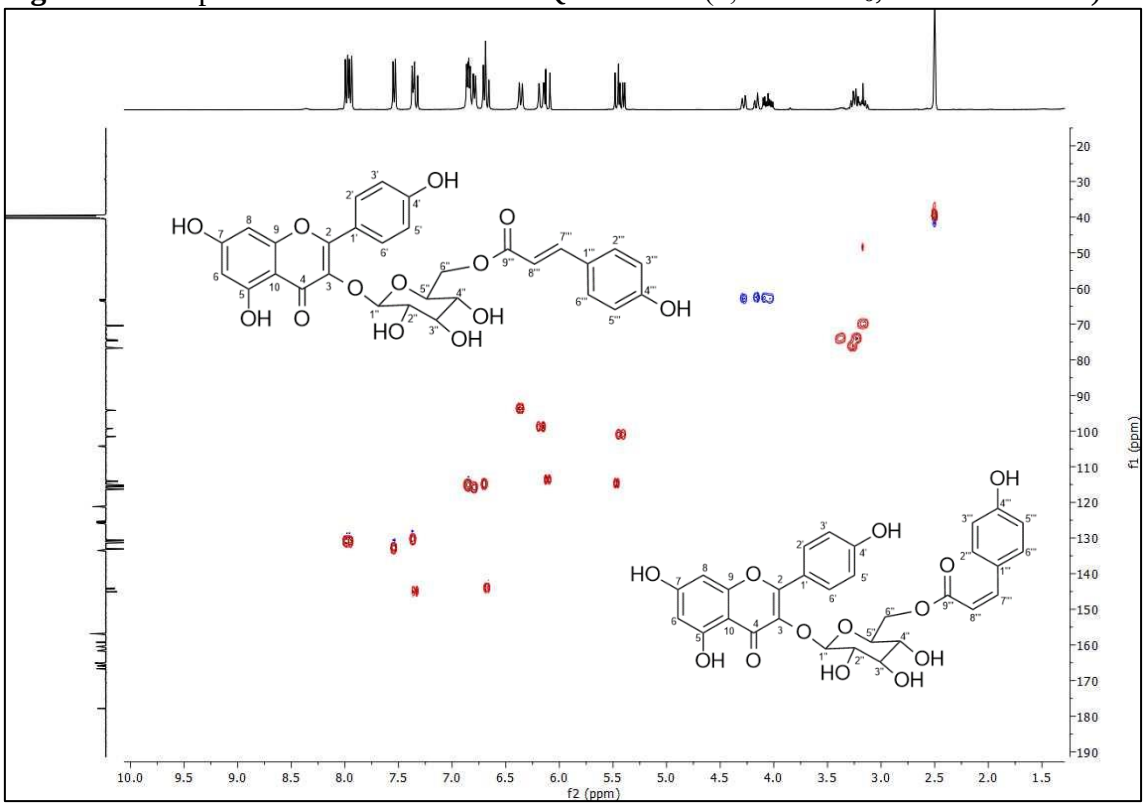
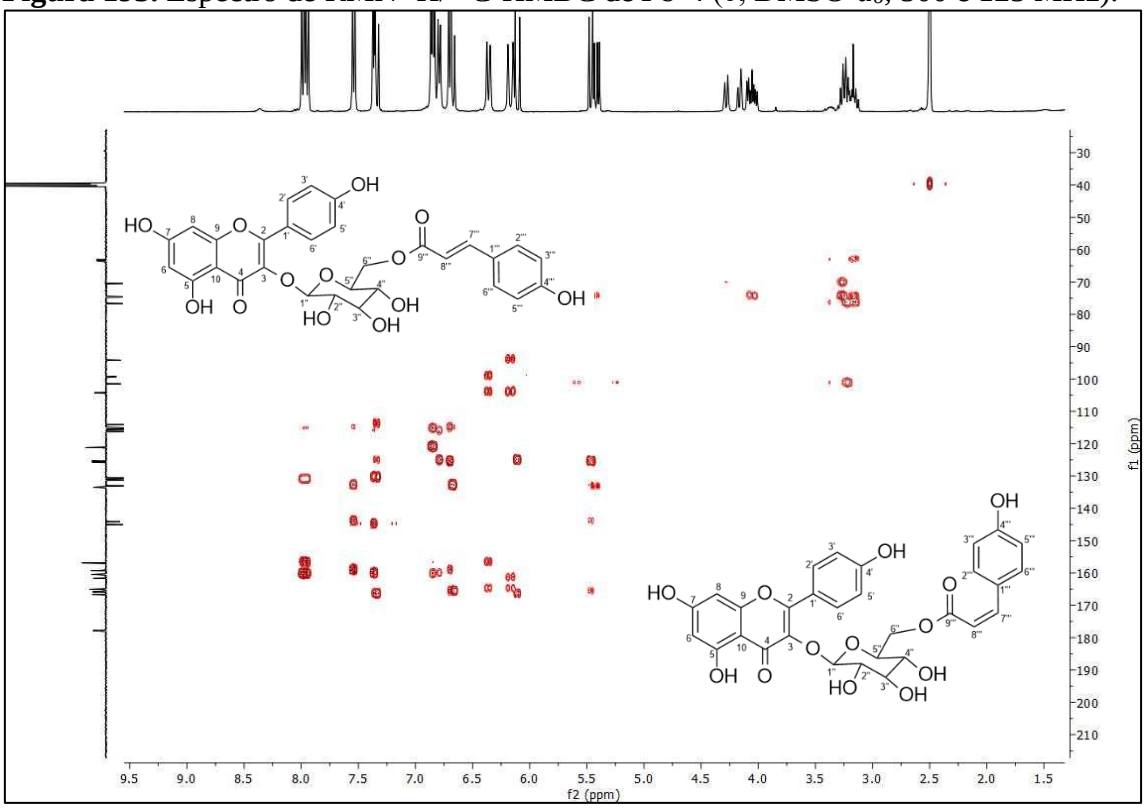



**Figura 193.** Espectro de RMN $^{1}H/^{13}C$-HMBC de *Pb*-4 (δ, DMSO-$d_6$, 500 e 125 MHz).

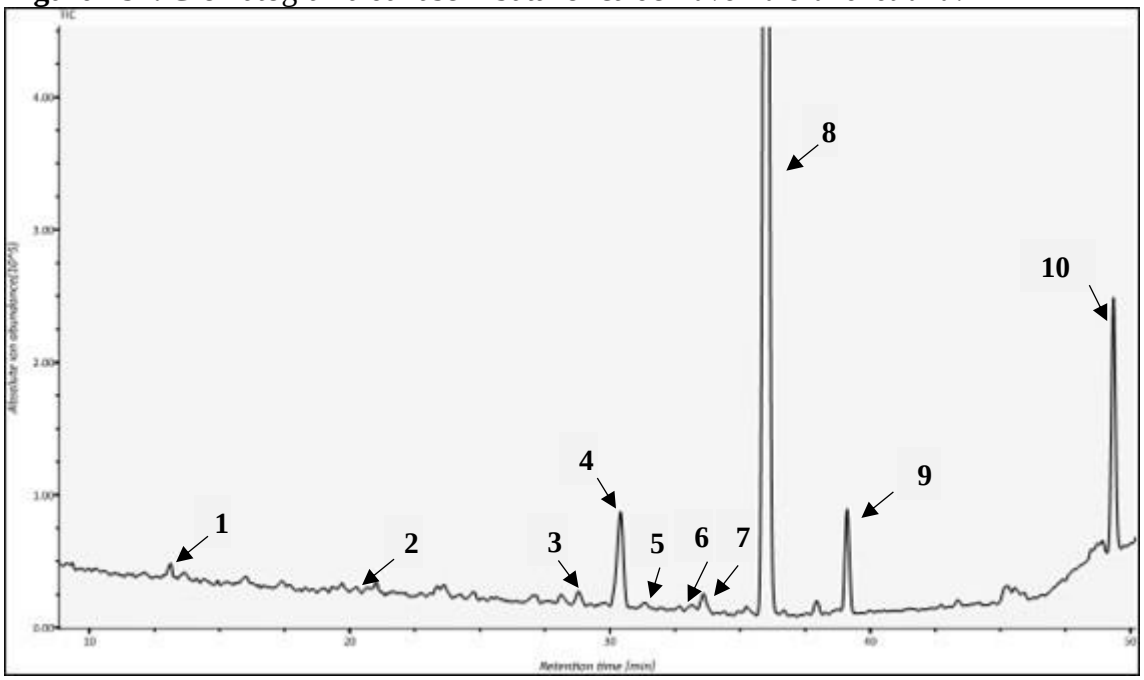


## 5.6 Substâncias anotadas por *CLAE-EM/EM* da fase n-butanólica do EEB das partes aéreas de *Pavonia blanchetiana*

A fase *n*-butanólica de *Pavonia blanchetiana* foi submetida à análise por Cromatografia Líquida de Alta Eficiência acoplada à Espectrometria de Massas (CLAE-EM/EM). A avaliação do cromatograma obtido (Figura 194, pág. 243) possibilitou a identificação de dez compostos (01-10), a partir da análise criteriosa dos padrões de fragmentação observados nos espectros de massas, em consonância com dados previamente reportados na literatura.

Os tempos de retenção, bem como os dados espectrométricos e as respectivas atribuições dos picos cromatográficos, foram estabelecidos utilizando ionização em modo negativo, encontrando-se detalhados na Tabela 40 (pág. 247) e no Quadro 19 (pág. 247). As propostas de fragmentação dos compostos identificados são apresentadas nas Figuras 195 a 213.

**Figura 194.** Cromatograma da fase n-butanólica de *Pavonia blanchetiana*.




A interpretação dos espectros de massas, obtidos em modo de ionização negativa, demonstrou que a fase n-butanólica analisada apresenta um perfil químico complexo, marcado pela presença de flavonoides glicosilados, ácidos fenólicos e outros metabólitos secundários. A identificação dessas classes de compostos foi fundamentada na observação de íons precursores, fragmentos e perdas neutras diagnósticas, bem como na

análise detalhada dos padrões de fragmentação e na comparação com dados da literatura.

Foi possível identificar a presença de derivados do ácido hidroxicinâmico. O composto **1** (TR: 13,118 min) com íon molecular *m/z* 315 ($[M-H]^-$) (Figura 195, pág. 248) apresentou uma perda neutra de 162 Da, resultando no fragmento *m/z* 153, que condiz com a fórmula molecular $C_7H_5O_4$ do ácido protocatecuico. A perda de 45 Da, referente ao grupo funcional ácido carboxílico, resultou no fragmento *m/z* 108, permitindo propor que a substância se tratava do ácido protocatecuico hexosídeo (Figura 196, pág. 248). Após comparações com os dados da literatura, foi sugerido que o composto **1** corresponderia ao ácido protocatecuico hexosídeo (Figuras 3 e 13) (ABU-REIDH et al., 2015).

O composto **2** (TR: 20,266 min) com íon molecular *m/z* 595 ($[M-H]^-$) apresentou dados compatíveis com a presença de duas unidades hexosídicas ligadas ao esqueleto flavonoídico por ligação *C*-glicosídica (Figura 197, pág. 248). O espectro de EM/EM revelou fragmentações características desse tipo de glicosilação, com a formação do íon em *m/z* 505, correspondente à perda neutra de 90 Da, atribuída a uma clivagem cruzada da unidade hexose, típica de flavonoides *C*-glicosilados. A fragmentação subsequente resultou no íon em *m/z* 385, associado à perda adicional de 120 Da, enquanto o íon observado em *m/z* 355 pode ser relacionado a rearranjos adicionais e perdas combinadas de unidades glicosídicas, corroborando a presença de duas hexoses ligadas por ligação C-C. Esses padrões de fragmentação comparados com dados previamente descritos na literatura, levou a propor que se trataria de um flavonoide di-*C*-glicosídeo, a naringenina-6,8-di-C-hexosídeo (Figura 198, pág. 249) (DU et al., 2024).

O composto **3** (TR: 28,780 min) revelou a presença de um íon precursor em *m/z* 463 ($[M-H]^-$) compatível com a estrutura de um flavonoide glicosilado (Figura 199, pág. 249). Não foram observados fragmentos significativos sob as condições empregadas de ionização, o que é consistente com a estabilidade característica dos glicosídeos *O*-ligados em modo negativo, onde a clivagem do açúcar requer energias mais elevadas. Com base no valor do íon molecular e na comparação com dados previamente relatados na literatura, este pico foi atribuído à miricitrina (miricetin-3-*O*-rhamnosídeo) ou à substância isoquercitrina (quercetina-3-O-glicosídeo), uma vez que este último composto foi isolado e caracterizado estruturalmente na espécie (Figura 200, pág. 250) (SOBEH et al., 2019).

O composto **4** (TR: 30,403 min) apresentou íon molecular em *m/z* 609 ($[M-H]^-$), sugerindo um flavonoide do tipo quercetina-rutinosídeo (Figura 201, pág. 250). No espectro $MS^2$, observou-se como pico base o fragmento em *m/z* 285, resultante da perda

da unidade rutinosídeo, correspondente à aglicona quercetina. O padrão de fragmentação corrobora a proposta de identificação do composto como rutina, conforme dados previamente descritos na literatura (Figura 202, pág. 250) (MATEOS et al., 2018).

O composto **5** (TR: 30,740 min) apresentou íon molecular em *m/z* 451 ($[M-H]^-$), sugerindo a presença de um tipo de dihidrochalcona C-glicosilada, possivelmente a aspalatina (Figura 203, pág. 251). A ausência de fragmentos significativos evidencia a estabilidade da ligação C-glicosídica sob as condições de ionização utilizadas. A atribuição deste pico à aspalatina apoia-se na comparação com dados publicados sobre extratos de *Aspalathus linearis*, nos quais compostos com massa equivalente foram identificados como C-glicosídeos dihidrochalconas característicos do perfil fenólico da planta. Após comparações com dados da literatura, este pico foi atribuído à aspalatina (Figura 204, pág. 251) (CARREIRA, 2024).

O composto **6** (TR: 32,680 min) apresentou um íon desprotonado em *m/z* 193 ($[M-H]^-$), compatível com a presença de um ácido fenólico, bastante comum encontrado em plantas (Figura 205, pág. 251). A fragmentação do composto gerou um pico secundário em *m/z* 160, correspondendo à perda de uma unidade de metanol -$CH_3OH$, 32 Da), característica típica de ácidos fenólicos metoxilados. Esses padrões de fragmentação confirmaram a identidade do ácido ferúlico, dados estes consistentes com dados previamente reportados na literatura (Figura 206, pág. 252) (SERGEANT et al., 2024).

O composto **7** (TR: 33,591 min) exibiu um íon molecular desprotonado em *m/z* 623 ($[M-H]^-$), sugerindo a presença de um flavonoide do tipo O-glicosilado (Figura 207, pág. 252). No espectro de fragmentação, observou-se a eliminação de 308 Da obtendo-se o pico base do fragmento em *m/z* 315, correspondente à aglicona isorhamnetina, resultante da perda da porção rutinosídeo, fragmentação esta característica de flavonoides O-glicosilados do tipo quercetina/metil-quercetina, confirmando a atribuição do composto e corroborando dados previamente relatados na literatura. Esses dados sugerem que o composto 7 poderia corresponder à narcissina (isorhamnetina-3-*O*-rutinosídeo) (Figura 208, pág. 252) (MATEOS et al., 2018; SOUZA et al., 2020).

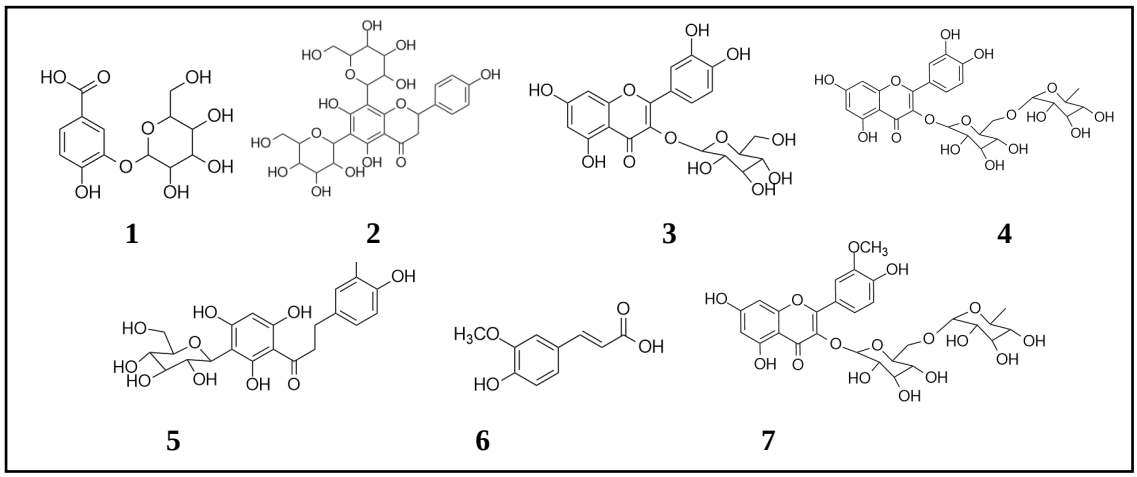
O composto **8** (TR: 35,254 min) apresentou íon molecular desprotonado em *m/z* 593 ($[M-H]^-$), sugerindo a presença de um flavonoide O-glicosilado do tipo canferol (Figura 209, pág. 253). No espectro de fragmentação, observou-se o fragmento em *m/z* 285, correspondente à aglicona canferol, resultante da perda da porção glicosídica. Esse padrão de fragmentação é característico de flavonoides O-glicosilados e permite a atribuição do composto como canferol-3-*O*-*β*-D-(6″-*E*-*p*-coumaroil)glicopiranosídeo,

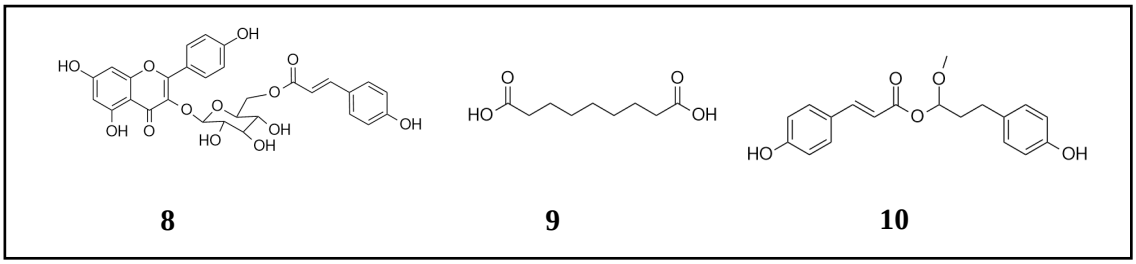
conhecido como tilirosídeo, corroborando os dados previamente reportados na literatura (Figura 210, pág. 253) (FELIPE et al., 2014; MATEOS et al., 2018).

O composto **9** (TR: 35,987 min) apresentou um íon molecular desprotonado em *m/z* 187 ($[M-H]^-$), compatível com a presença de um ácido dicarboxílico natural comumente encontrado em plantas (Figura 211, pág. 253). Para este composto, observou-se um fragmento em m/z 128, resultante da clivagem de uma das extremidades carboxílicas, característico da fragmentação desse tipo de ácido dicarboxílico, bem como um fragmento em m/z 125, com perda de H2 e rearranjos de hidrogênio em sua estrutura química. Após dados comparativos com a literatura para ácidos carboxílicos lineares, foi possível identificar e propor a estrutura do ácido azelaico na amostra analisada (Figura 212, pág. 254) (ZEGHBIB et al., 2024).

O composto **10** (TR: 49,352 min) apresentou um íon molecular desprotonado em *m/z* 327 ($[M-H]^-$), característico de uma molécula aromática conjugada com presença de metoxila em sua estrutura (Figura 213, pág. 254). Um fragmento em *m/z* 165 indicou a perda de 163 Da, possivelmente da unidade de fenilpropanoide da estrutura química curcuminoide. Outro fragmento evidenciado em *m/z* 119 advindo da porção $C_9H_7O_3$ com perda da unidade de $CO_2$ (44 Da) é típico de íons aromáticos estabilizados resultantes da clivagem da cadeia principal e manutenção de uma subestrutura fenilpropanoide ou anel aromático com grupos OH. Em compostos desse tipo, as perdas neutras mais comuns incluem água, $CO/CO_2$ e metanol, e os íons aromáticos resultantes refletem a estabilidade por ressonância dos anéis substituídos, sendo possível identificar e propor a estrutura do (*E*)-3-(4-hidroxifenil)-1-metoxipropil-3-(4-hidroxipefenil)acrilato na amostra analisada (Figura 214, pág. 255) (JIANG et al., 2006).

**Quadro 19.** Substâncias anotadas na fase n-butanólica de *Pavonia blanchetiana*.





**8** **9** **10**

**Tabela 40.** Íons *m/z* $[M-H]^-$, Fragmentos $MS^2$ dos compostos obtidos por CLAE-EM/EM da Fase n-butanólica de *Pavonia blanchetiana*.

| Compostos | TR (min.) | $[M-H]^-$ | Íons fragmentos *m/z* | Identificação | Referências |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 13,118 | 315 | 108 | Ácido protocatecuico hexosídeo | ABU-REIDH et al., 2015 |
| 2 | 20,266 | 595 | 505; 385; 355 | Naringenina-6,8-di-C-hexosídeo | DU et al., 2024 |
| 3 | 28,780 | 463 | - | Isoquercitrina | SOBEH et al., 2019 |
| 4 | 30,403 | 609 | 300 | Rutina | MATEOS et al., 2018 |
| 5 | 30,740 | 451 | - | Aspalatina | CARREIRA, 2024 |
| 6 | 32,680 | 193 | 160 | Ácido ferúlico | SERGEANT et al., 2024 |
| 7 | 33,591 | 623 | 315 | Narcissina | MATEOS et al., 2018; SOUZA et al., 2020 |
| 8 | 35,254 | 593 | 285 | Tilirosídeo | FELIPE et al., 2014; MATEOS et al., 2018 |
| 9 | 35,987 | 187 | 125 | Ácido azelaico | ZEGHBIB et al., 2024 |
| 10 | 49,352 | 327 | 165; 119 | (*E*)-3-(4-hidroxifenil)-1-metoxipropil-3-(4-hidroxipefenil)acrilato | JIANG et al., 2006 |

**Figura 195.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 315, referente à ionização do composto **1**.

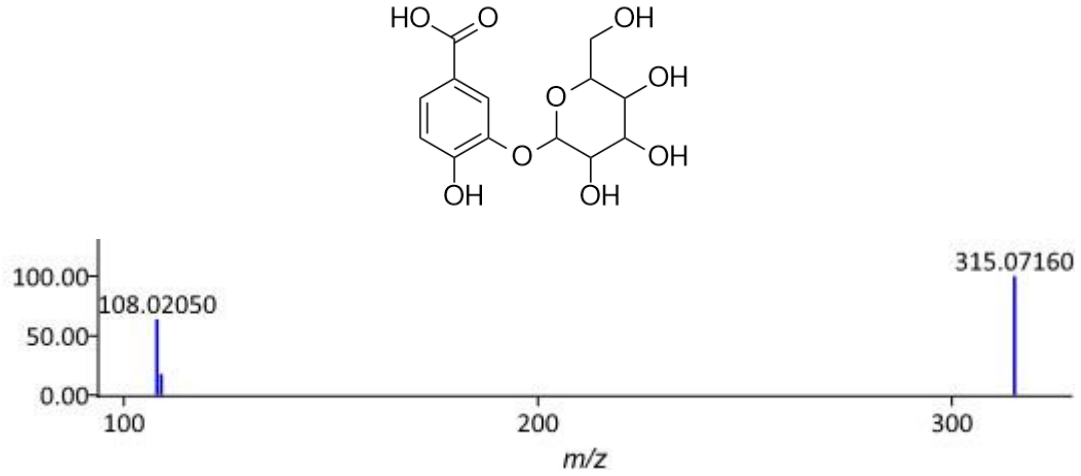



**Figura 196.** Via de fragmentação do composto **1**, em IES-EM/EM modo negativo.

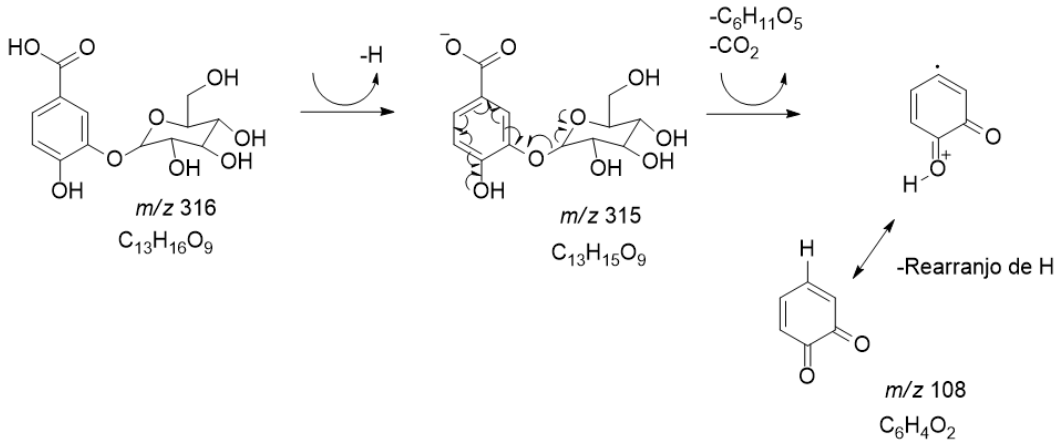



**Figura 197.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 595, referente à ionização do composto **2.**

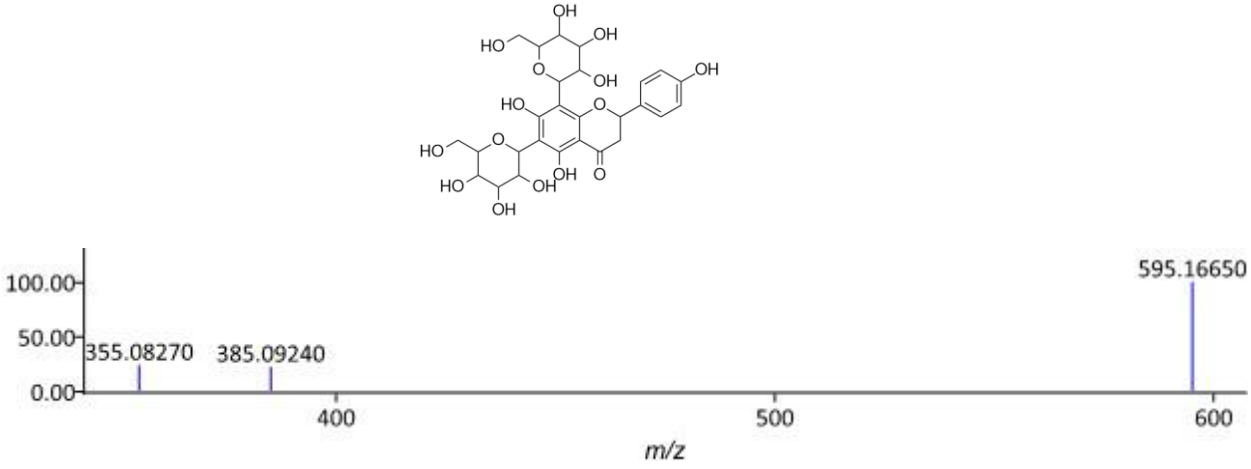


**Figura 198.** Via de fragmentação do composto **2**, em IES-EM/EM modo negativo.

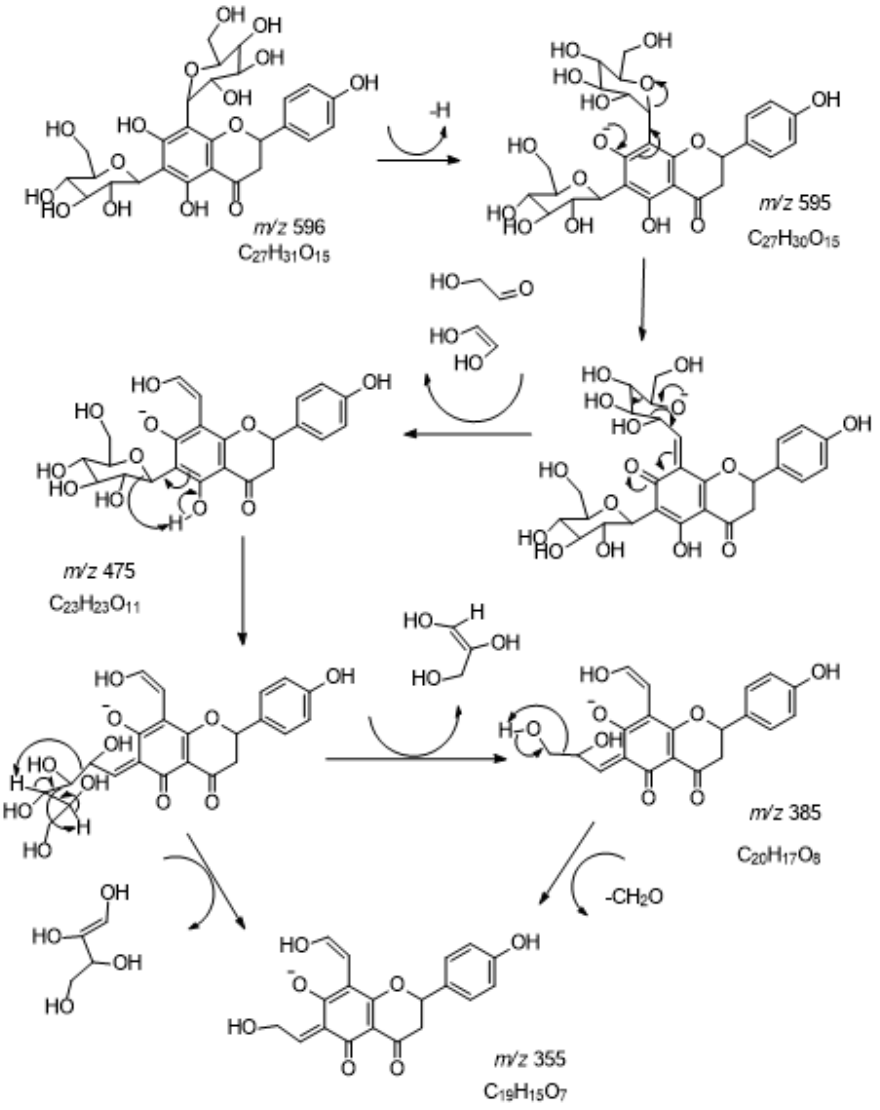



**Figura 199.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 463, referente à ionização do composto **3.**

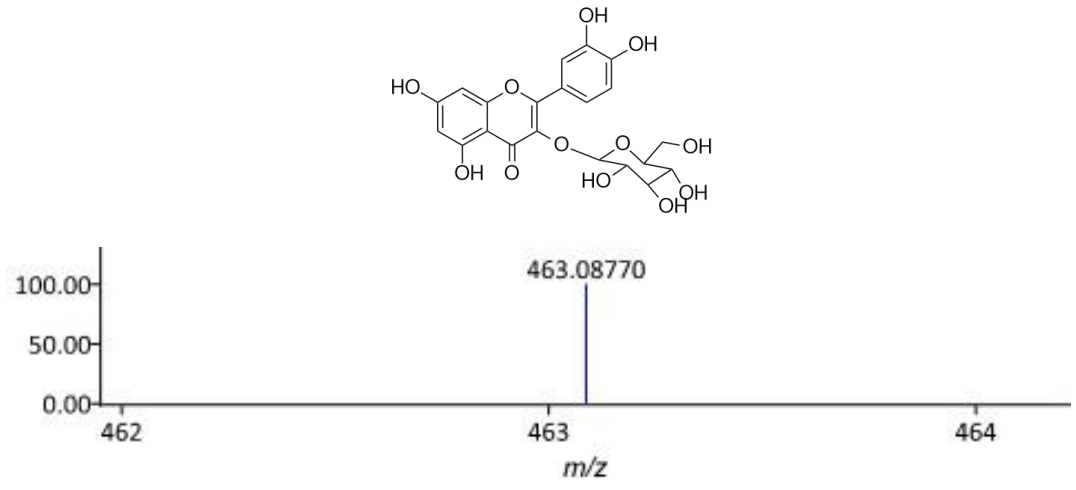


**Figura 200.** Via de fragmentação do composto **3**, em IES-EM/EM modo negativo.

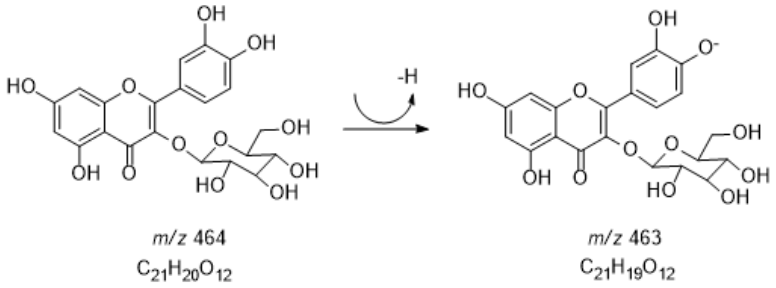



**Figura 201.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 609, referente à ionização do composto **4.**

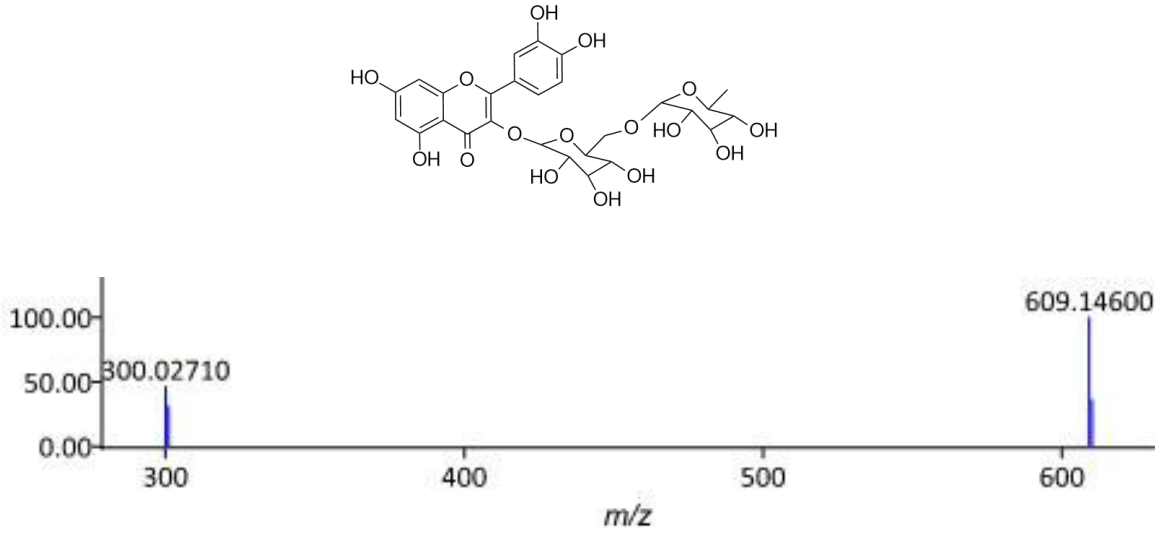



**Figura 202.** Via de fragmentação do composto **4**, em IES-EM/EM modo negativo.

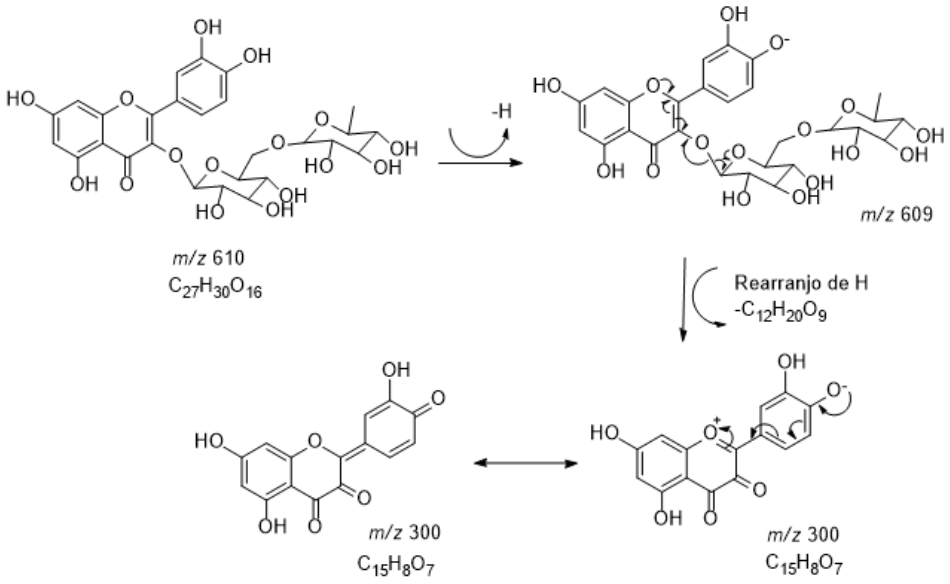


**Figura 203.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 451, referente à ionização do composto **5.**

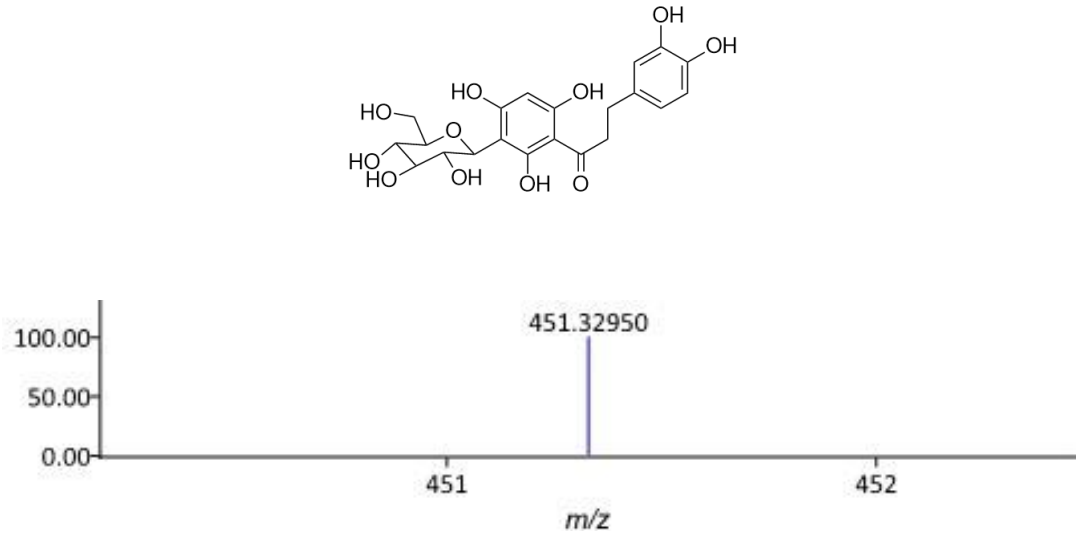



**Figura 204.** Via de fragmentação do composto **5**, em IES-EM/EM modo negativo.

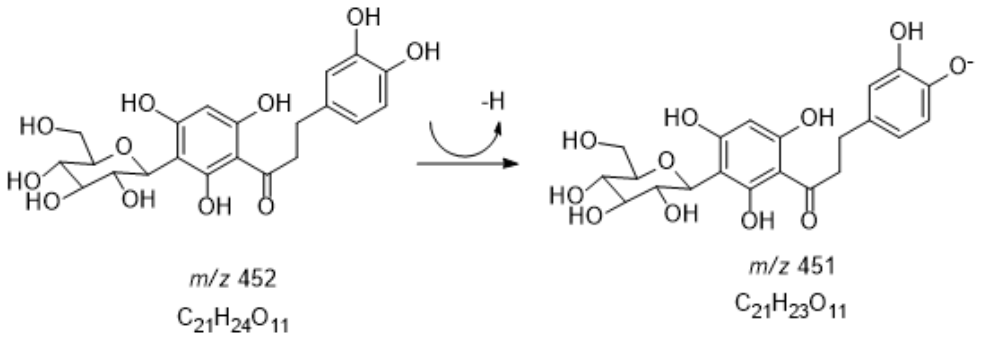



**Figura 205.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 193, referente à ionização do composto **6.**

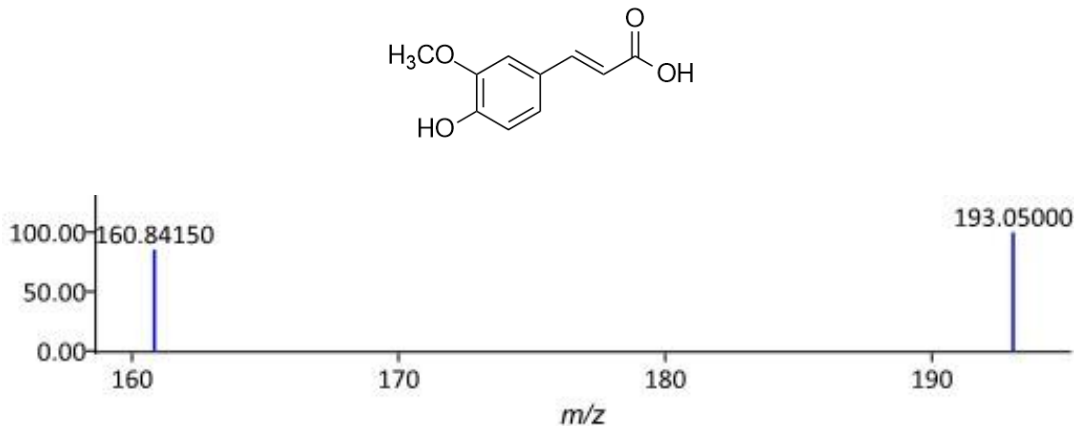


**Figura 206.** Via de fragmentação do composto **6**, em IES-EM/EM modo negativo.

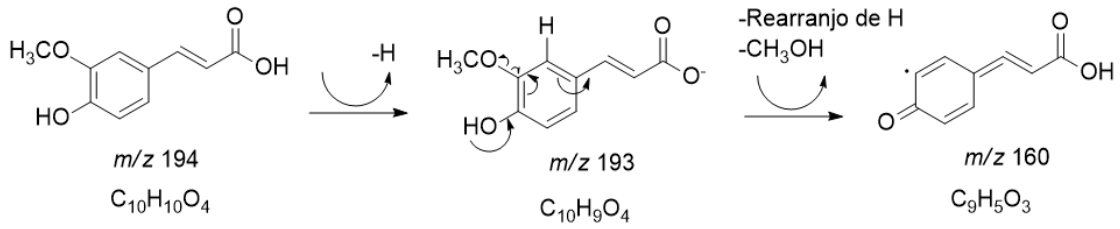



**Figura 207.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 623, referente à ionização do composto **7.**

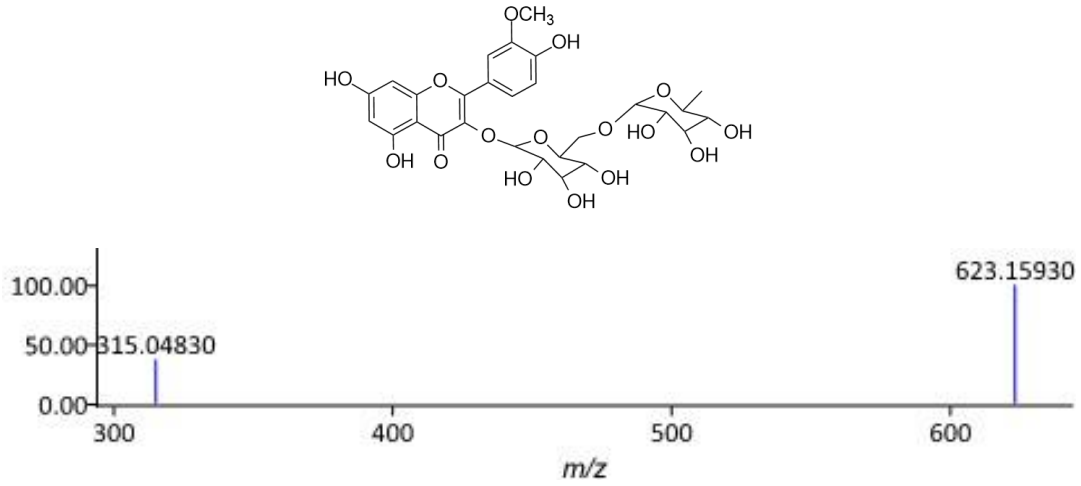



**Figura 208.** Via de fragmentação do composto **7**, em IES-EM/EM modo negativo.

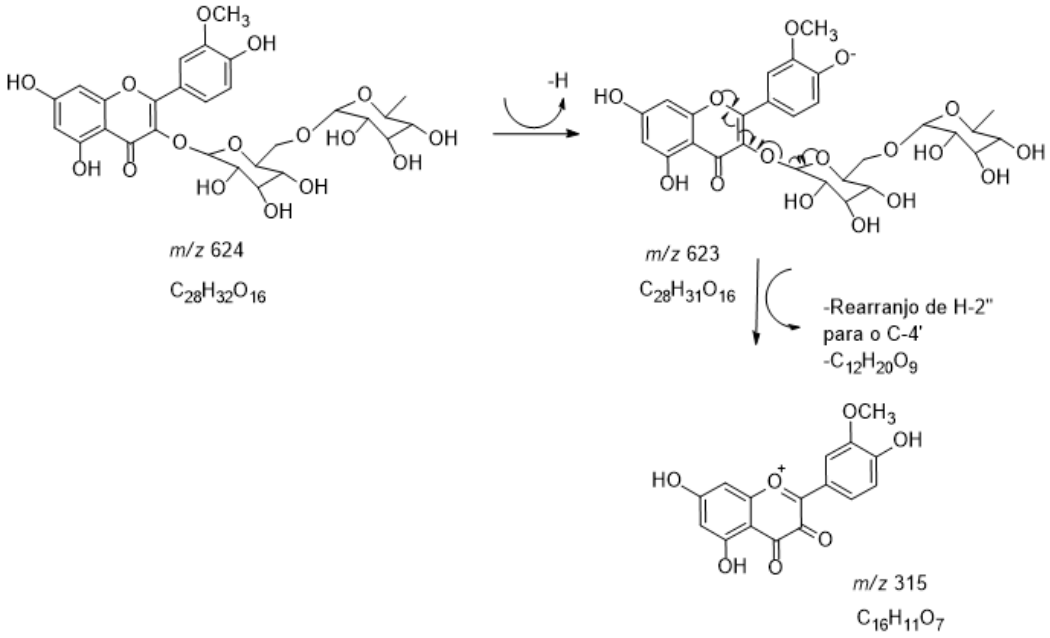


**Figura 209.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 593, referente à ionização do composto **8.**

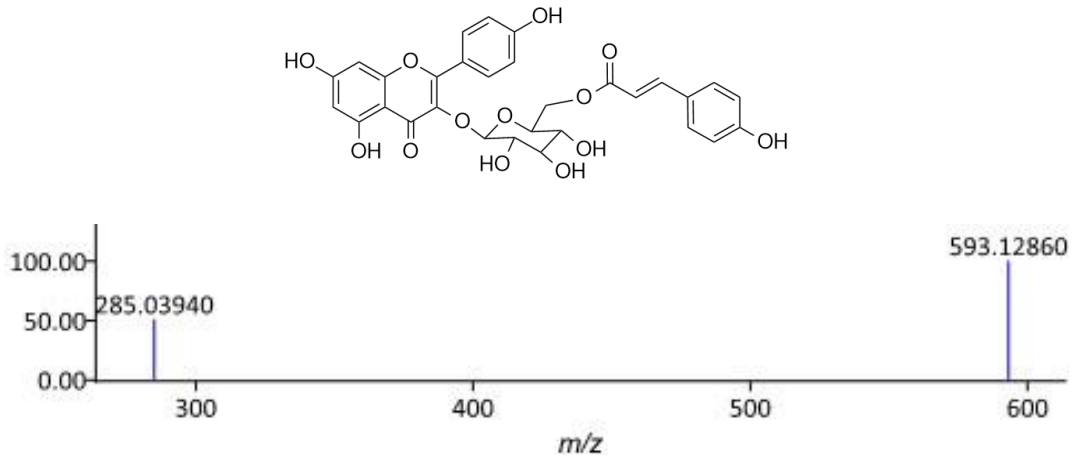



**Figura 210.** Via de fragmentação do composto **8**, em IES-EM/EM modo negativo.

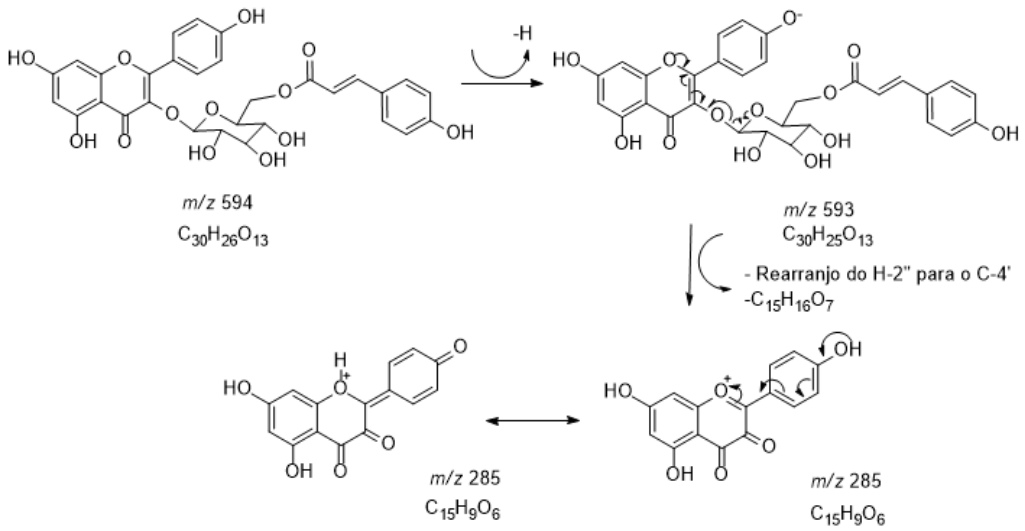



**Figura 211.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 187, referente à ionização do composto **9.**

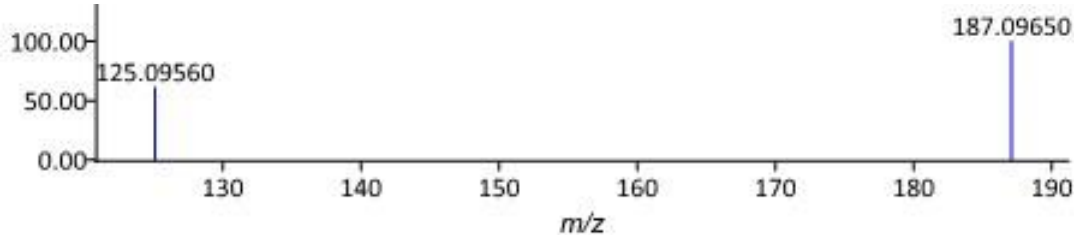


**Figura 212.** Via de fragmentação do composto **9**, em IES-EM/EM modo negativo.

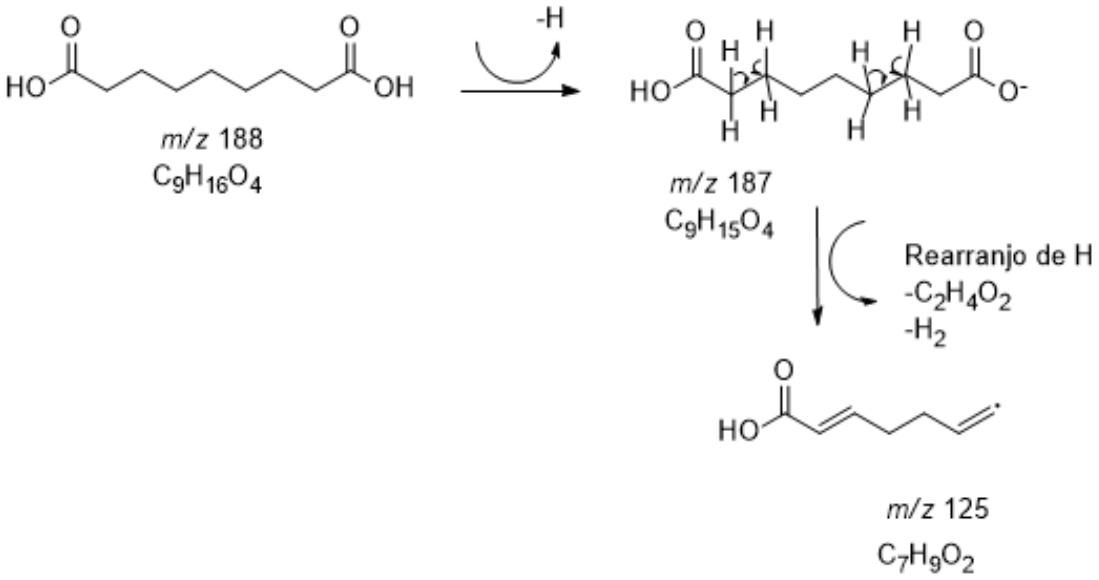



**Figura 213.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 327, referente à ionização do composto **10.**

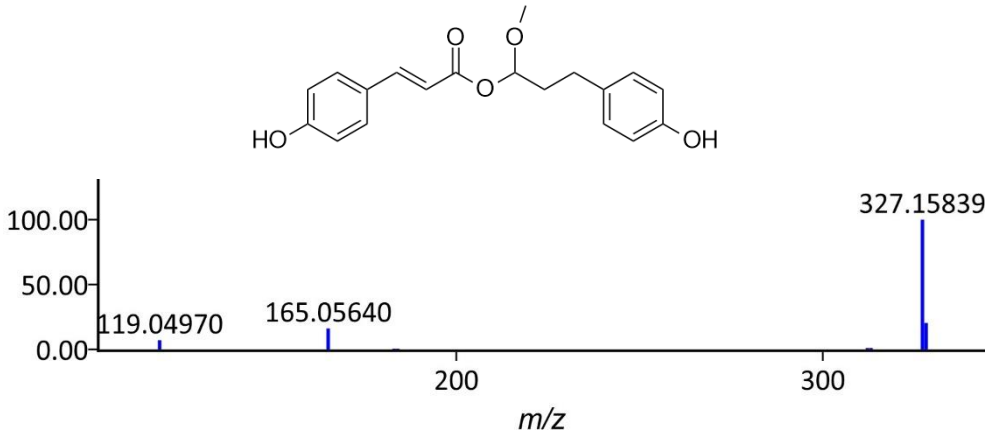
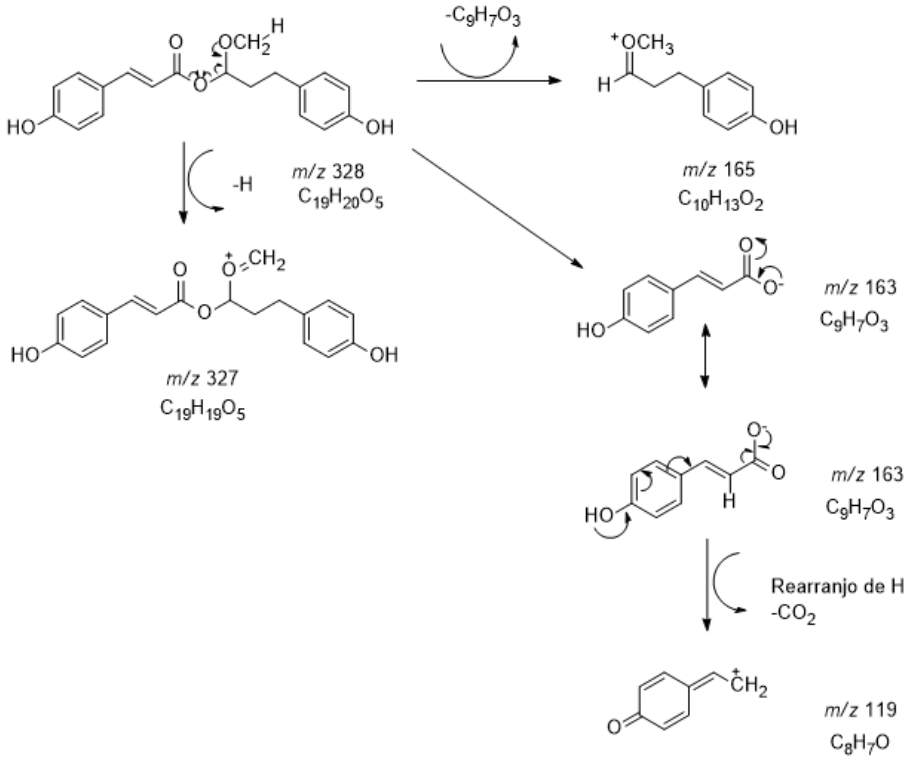


**Figura 214.** Via de fragmentação do composto **10**, em IES-EM/EM modo negativo.



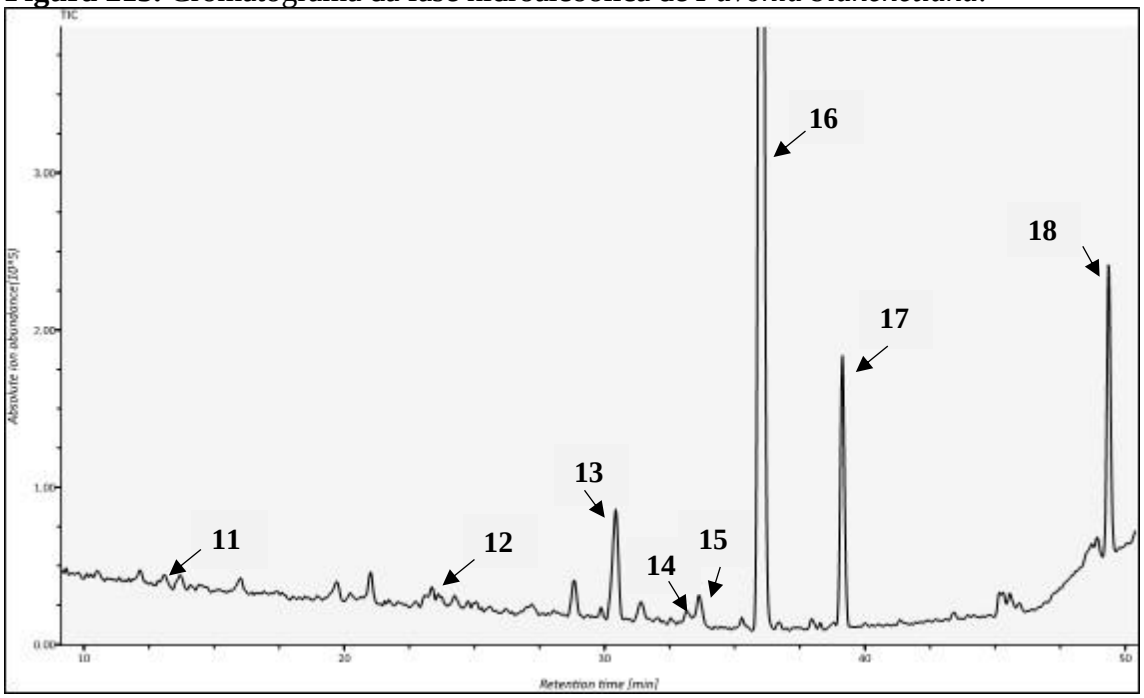

## 5.7 Substâncias anotadas por *CLAE-EM/EM* da fase hidroalcoólica do EEB das partes aéreas de *Pavonia blanchetiana*

A fase hidroalcoólica de *Pavonia blanchetiana* foi analisada por Cromatografia Líquida de Alta Eficiência acoplada à Espectrometria de Massas (CLAE-EM/EM), de forma análoga ao procedimento utilizado para a fração n-butanólica. A interpretação do cromatograma obtido (Figura 215, pág. 256) permitiu identificar oito compostos (01-08) com base na avaliação detalhada dos padrões de fragmentação observados nos espectros de massas e em comparação com dados previamente descritos na literatura.

Os tempos de retenção, os dados espectrométricos e as atribuições correspondentes aos picos cromatográficos foram determinados empregando ionização em modo negativo e estão apresentados na Tabela 41 (pág. 258) e no Quadro 20 (pág. 257). As propostas de fragmentação para os compostos identificados encontram-se ilustradas nas Figuras 216-225 (págs. 260-263).

Na análise comparativa das duas fases obtidas do procedimento de cromatografia líquido-líquido do EEB de *Pavonia blanchetiana*, foi possível identificar dez compostos para a fase n-butanólica e oito compostos para a fase hidroalcoólica, ambas determinadas por CLAE acoplada à espectrometria de massas.

**Figura 215.** Cromatograma da fase hidroalcoólica de *Pavonia blanchetiana*.




A partir da sobreposição dos perfis cromatográficos, observou-se que seis dos compostos identificados na fase hidroalcoólica também foram detectados na fase n-butanólica, corroborando sua recorrência em ambas as matrizes e reforçando a robustez da metodologia de identificação baseada em padrões de fragmentação e na comparação com dados da literatura.

Os compostos **11**, **13**, **15-18** foram identificados como sendo o ácido protocatecuico hexosídeo, rutina, narcissina, tilirosídeo, ácido azelaico e o (*E*)-3-(4-hidroxifenil)-1-metoxipropil-3-(4-hidroxipefenil)acrilato, respectivamente, definidos anteriormente na fase n-butanólica como os compostos **1**, **4**, **7-10.**

Além desses seis compostos comuns, foram identificadas duas substâncias adicionais exclusivas da fase hidroalcoólica, que até então não haviam sido descritas na fase n-butanólica e que ampliam o conhecimento do perfil fitoquímico da espécie. As características espectrométricas desses dois compostos foram analisadas com base em seus padrões de fragmentação e integradas ao conjunto de dados, a fim de ampliar a compreensão da composição química diferencial entre as fases.

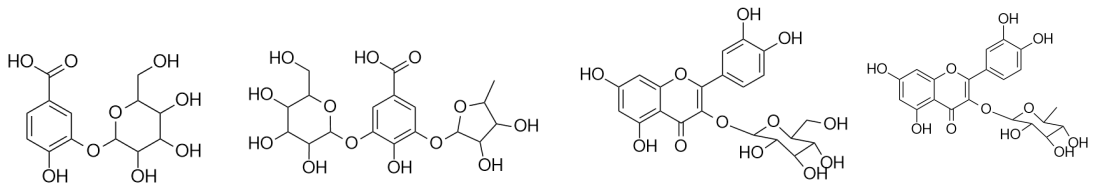
O composto **12** (TR: 23,374 min) apresentou um íon molecular desprotonado em *m/z* 447 ($[M-H]^-$), sugerindo a presença de um glicosídeo de ácido gálico. A presença do íon em m/z 401 pode ser explicada por a perda de 46 Da (possivelmente representando perda de $CO_2$ + $H_2O$ ou fragmentações secundárias no açúcar) a partir do precursor de *m/z* 447, indicando a quebra da ligação entre a fração glicídica e partes da aglicona

fenólica. A formação de um fragmento em *m/z* 269 com perda de 132 Da sugere ainda uma clivagem mais extensa da cadeia de açúcar, produzindo um íon que corresponde a uma porção menor, mas significativa, do sistema aromático ligado à parte residual do açúcar.

Esse padrão em torno de *m/z* 447, seguido por perdas consecutivas levando a íons em *m/z* 401 e *m/z* 269 é consistente com um glicosídeo fenólico onde a hexose está ligada ao ácido gálico, e as perdas neutras envolvem a remoção de partes da unidade de açúcar, apresentando fragmentações pela perda de unidades de açúcar e fragmentos derivados da estrutura aromática do ácido gálico, sendo possível identificar e propor a estrutura do ácido 3-((3,4-di-hidroxi-5-metiltetrahidrofurano-2-il)oxi)-4-hidroxi-5-((3,4,5-tri-hidroxi-6-(hidroximetil)tetrahidro-2H-pirano-2-il)oxi)benzoico (Figuras 217-218, págs. 260-261) (LIU & SEERAM, 2018).

O composto **14** (TR: 33,156 min) apresentou um íon molecular desprotonado em *m/z* 447 ([M-H]$^-$), valor consistentemente associado a flavonoides O-glicosilados com uma unidade de açúcar ligada a uma aglicona flavonol. Entre os compostos mais comuns que apresentam esse precursor estão a quercitrina (quercetina-3-*O*-ramnosídeo) e a astragalina (canferol-3-*O*-glicosídeo), ambos flavonoides naturais amplamente distribuídos em extratos vegetais. Compostos dessa classe geram o íon molecular em *m/z* 447, o que permite inferi-lo preliminarmente a partir das informações espectrométricas disponíveis (Figuras 220-221, pág. 262) (HONG; LIAO; CHEN, 2021). A detecção deste íon na amostra foi, portanto, atribuída à presença do flavonoide quercitrina, uma vez que esse composto foi isolado a partir de *Pavonia blanchetiana* e sua estrutura foi confirmada com base em dados espectrais de RMN $^1$H e $^{13}$C, comparados com dados da literatura, o que permitiu a caracterização estrutural definitiva da substância.

**Quadro 20.** Substâncias anotadas na fase hidroalcoólica de *Pavonia blanchetiana*.



**11** **12** **13** **14**

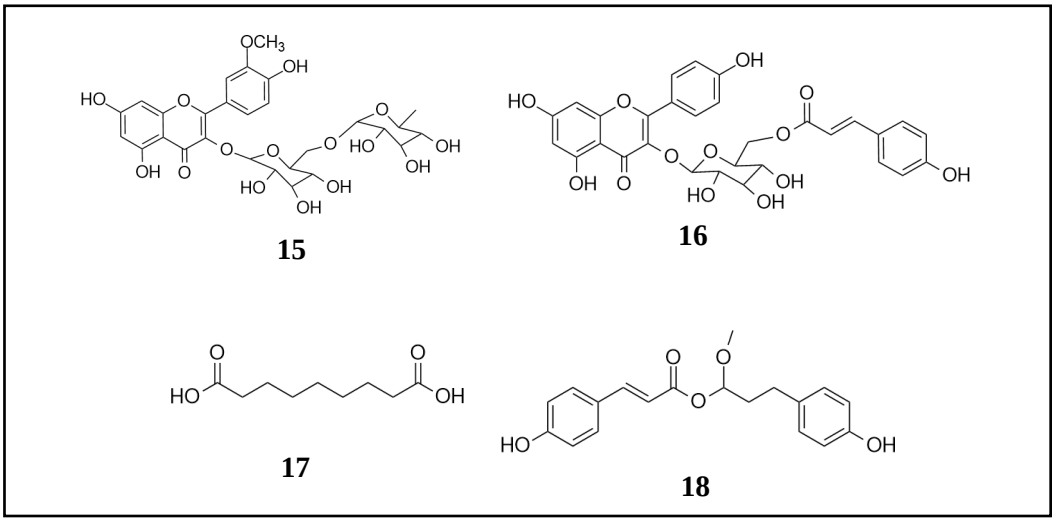



**Tabela 41.** Íons *m/z* [M-H]$^{-}$, Fragmentos MS$^{2}$ dos compostos obtidos por CLAE-EM/EM da Fase hidroalcoólica de *Pavonia blanchetiana*.

| Compostos | TR (min.) | [M-H]$^{-}$ | Íons fragmentos *m/z* | Identificação | Referências |
|---|---|---|---|---|---|
| 11 | 13,098 | 315 | 108 | Ácido protocatecuico hexosídeo | ABU-REIDH et al., 2015 |
| 12 | 23,374 | 447 | 401; 269 | Ácido 3-((3,4-di-hidroxi-5-metiltetrahidrofurano-2-il)oxi)-4-hidroxi-5-((3,4,5-tri-hidroxi-6-(hidroximetil)tetrahidro-2H-pirano-2-il)oxi)benzoico | LIU & SEERAM, 2018 |
| 13 | 30,423 | 609 | 300 | Rutina | MATEOS et al., 2018 |
| 14 | 33,156 | 447 | - | Quercitrina | HONG; LIAO; CHEN, 2021 |
| 15 | 33,631 | 623 | 315 | Narcissina | MATEOS et al., 2018; SOUZA et al., 2020 |
| 16 | 36,007 | 593 | 285 | Tilirosídeo | FELIPE et al., 2014; MATEOS et al., 2018 |
| 17 | 39,135 | 187 | 125 | Ácido azelaico | ZEGHBIB et al., 2024 |
| 18 | 48,936 | 327 | 165; 119 | (*E*)-3-(4-hidroxifenil)-1-metoxipropil-3-(4-hidroxipefenil)acrilato | JIANG et al., 2006 |

As rotas de fragmentação dos compostos **11, 13** e **15-18** são análogas às dos compostos previamente identificados na fase n-butanólica de *Pavonia blanchetiana*, indicando que os mecanismos de quebra são equivalentes em ambas as fases. As fragmentações dos compostos **12** e **14** serão evidenciadas em seguida, permitindo a comparação e confirmação dos seus respectivos padrões espectrais.

**Figura 216.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 315, referente à ionização do composto **11.**

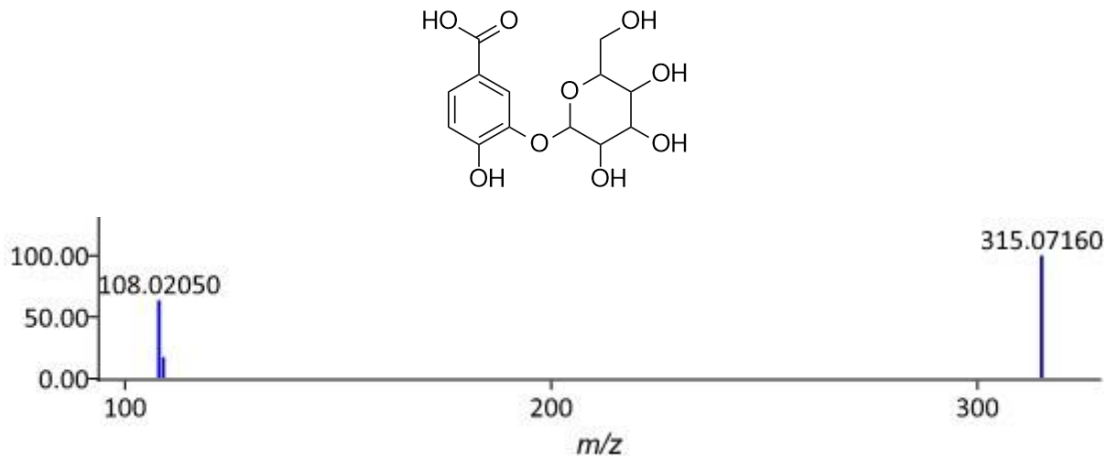



**Figura 217.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 447, referente à ionização do composto **12.**

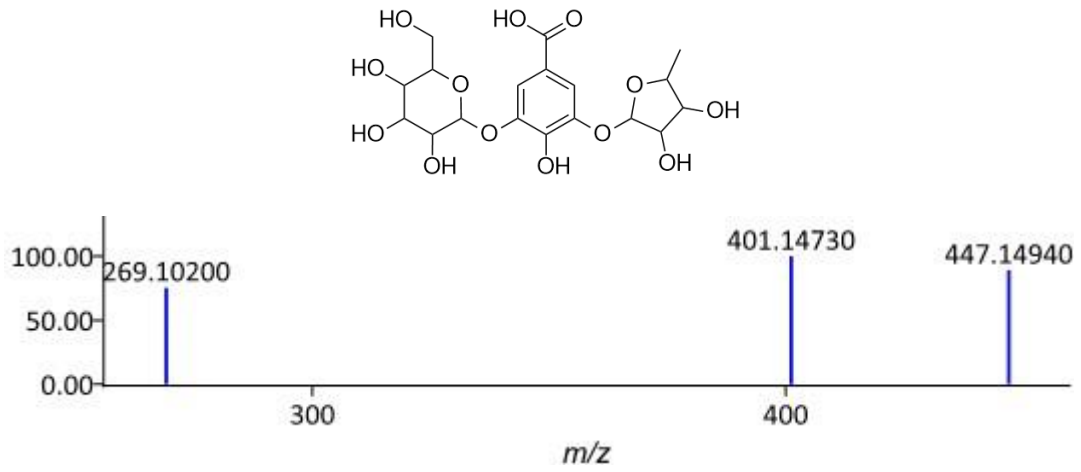


**Figura 218.** Via de fragmentação do composto **12**, em IES-EM/EM modo negativo.

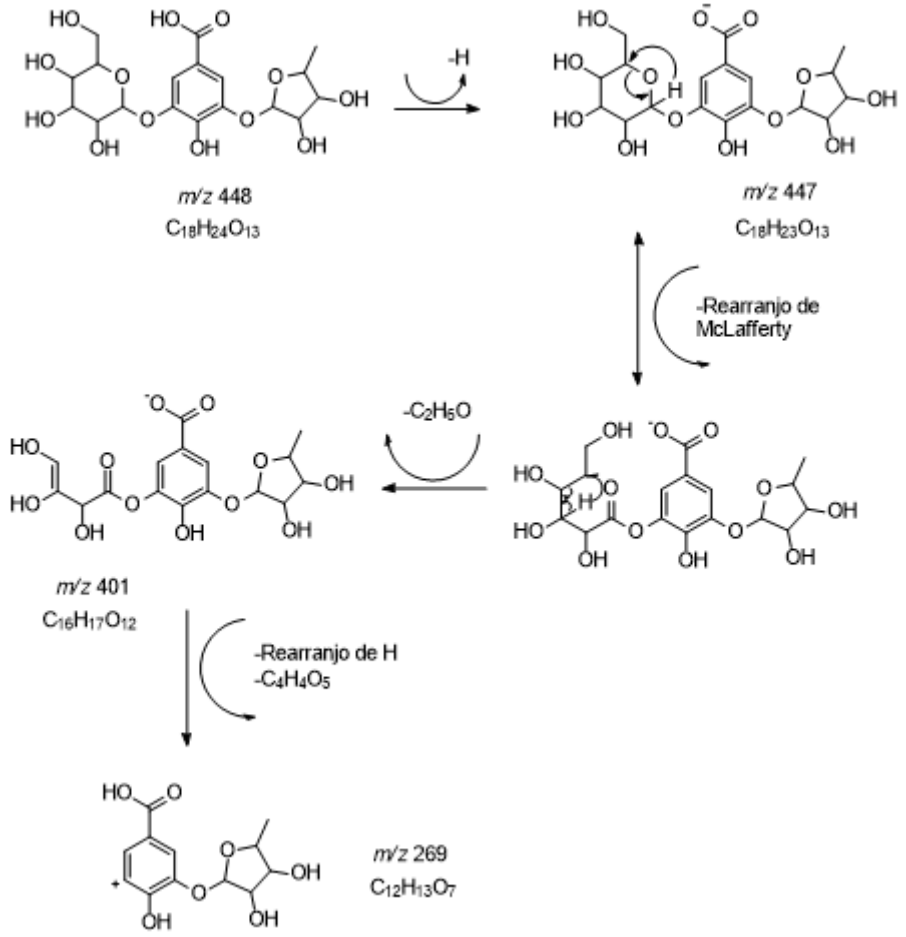



**Figura 219.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 609, referente à ionização do composto **13.**

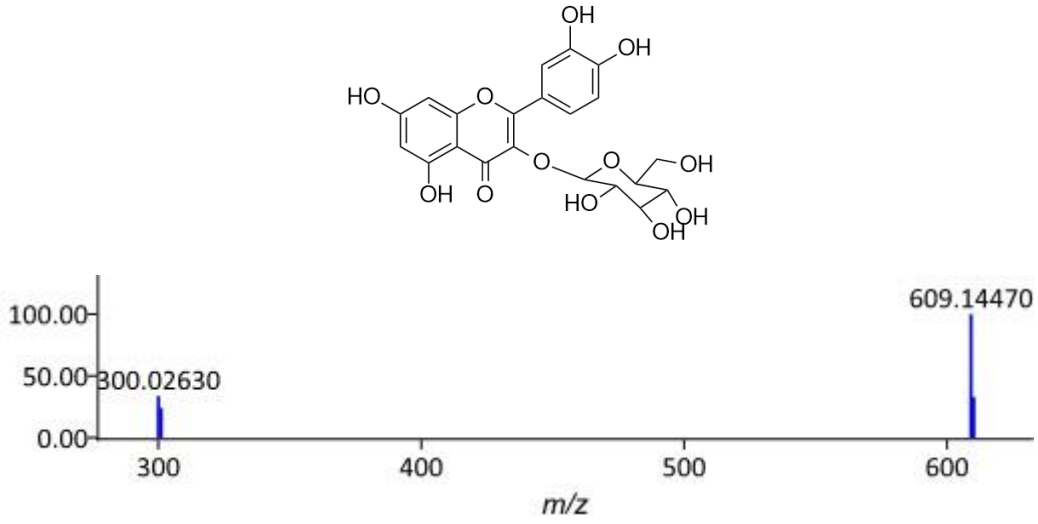


**Figura 220.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 447, referente à ionização do composto **14**.

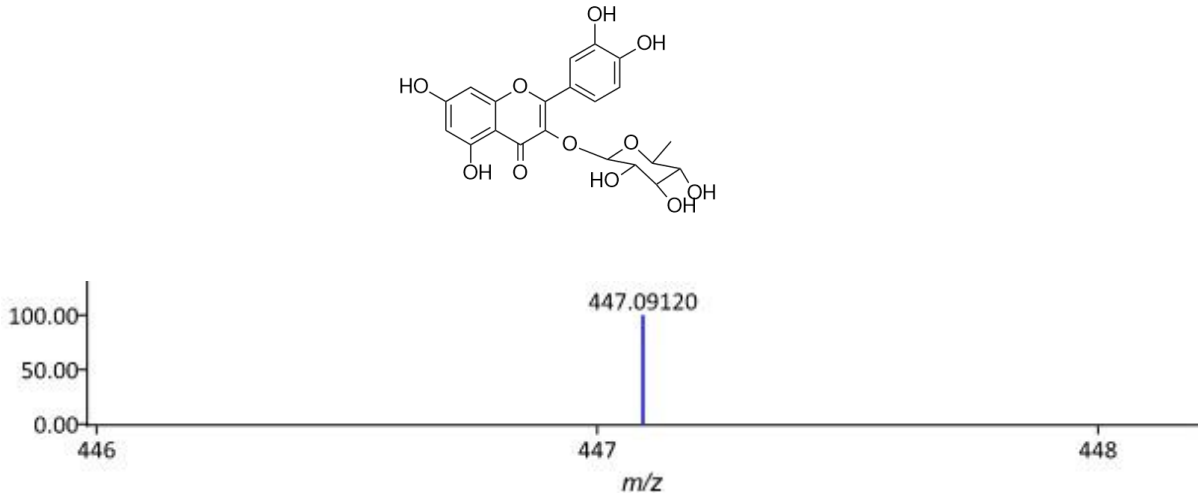



**Figura 221.** Via de fragmentação do composto **14**, em IES-EM/EM modo negativo.

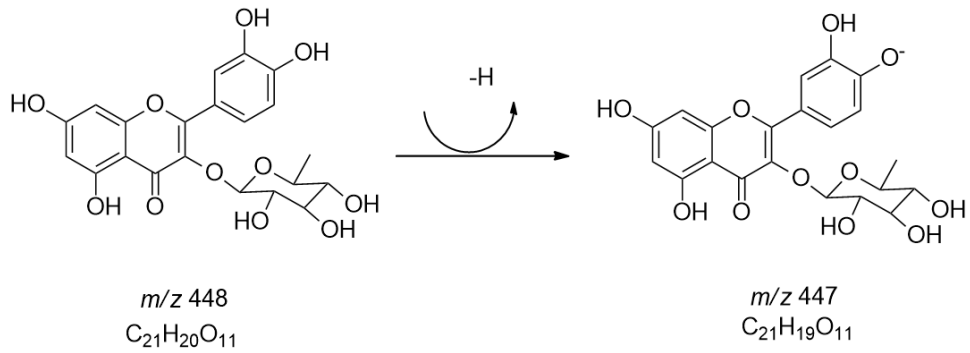



**Figura 222.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 623, referente à ionização do composto **15.**

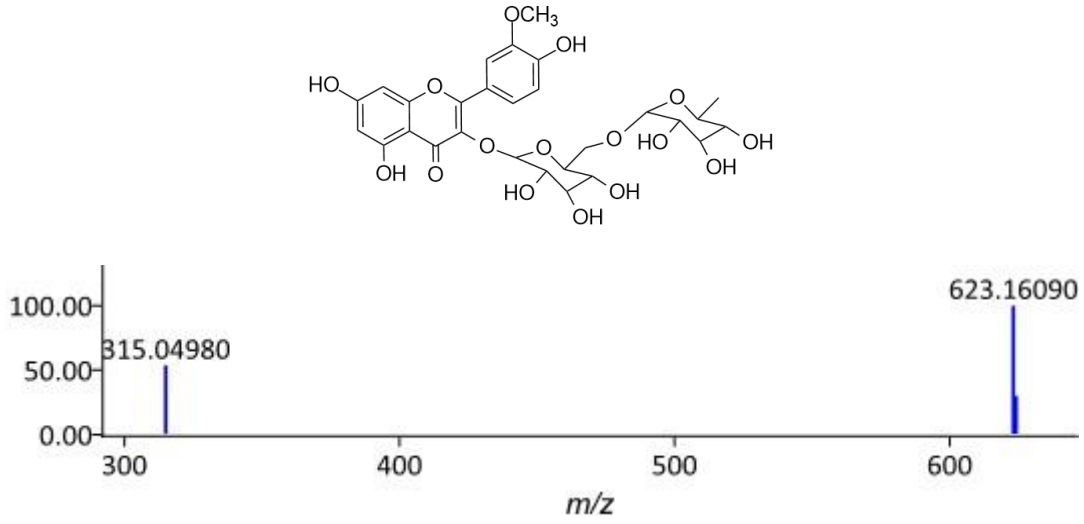


**Figura 223.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 593, referente à ionização do composto **16.**

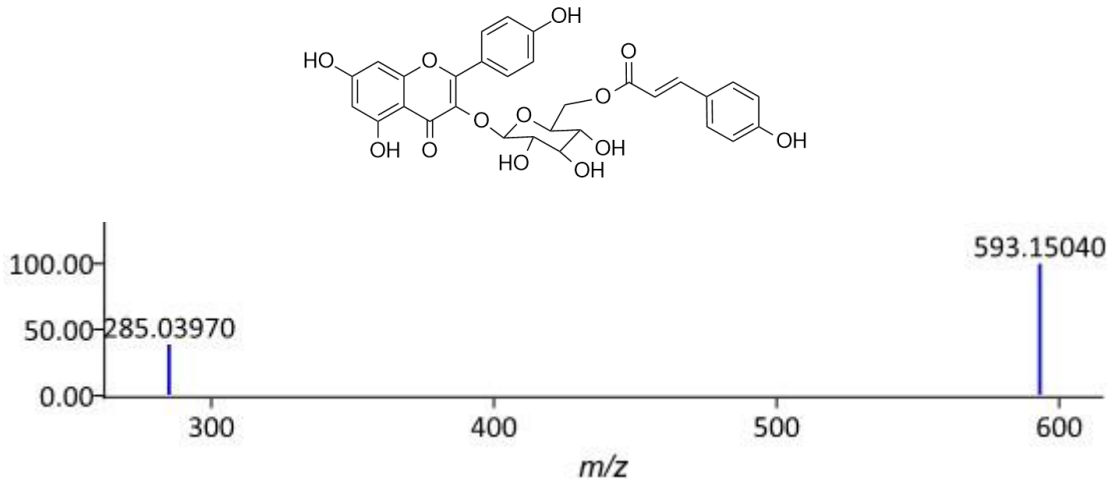



**Figura 224.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 187, referente à ionização do composto **17.**

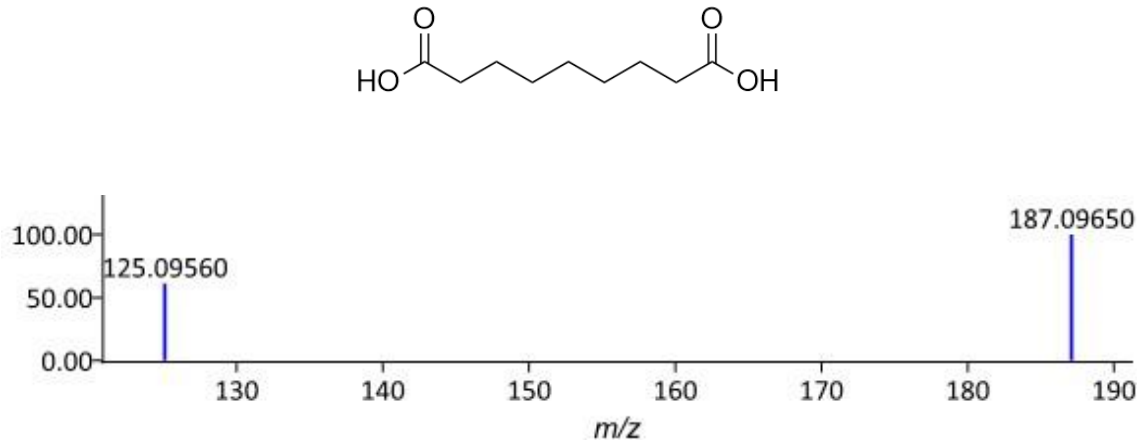
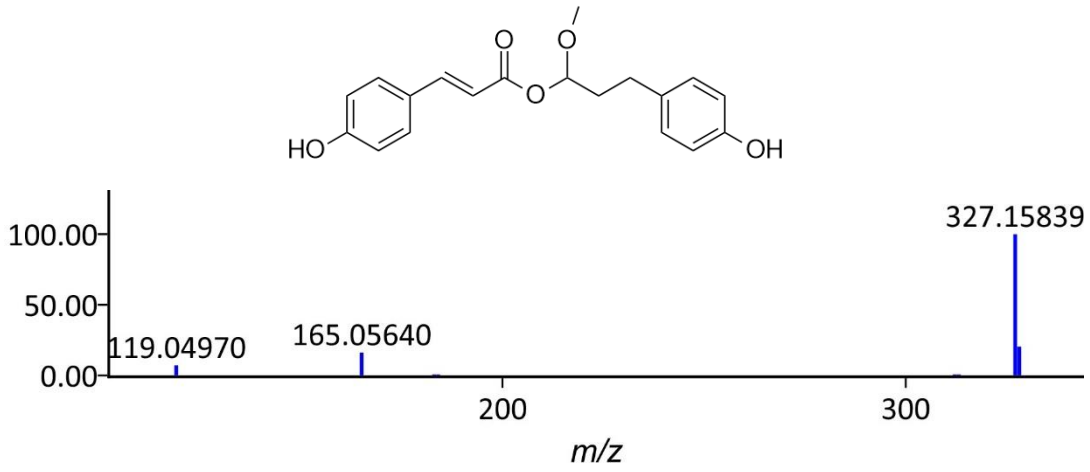



**Figura 225.** Espectro de IES-EM/EM com as fragmentações do íon *m/z* 327, referente à ionização do composto **18.**

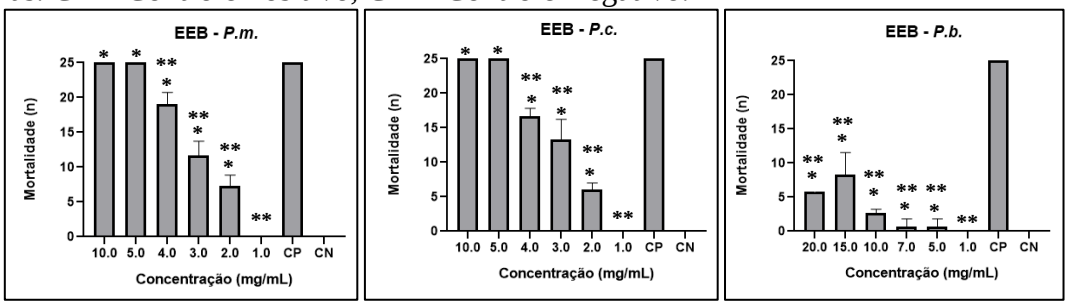


## 5.8 Avaliação da atividade larvicida dos extratos e fases de *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana* frente a larvas L4 de *Aedes aegypti* L.

A análise dos resultados evidencia que os extratos vegetais fracionados apresentam uma atividade larvicida significativa contra *Aedes aegypti*, com valores de $CL_{50}$ que variam amplamente em função da polaridade do solvente empregado, da espécie vegetal e das condições experimentais. De modo geral, os bioensaios foram conduzidos em triplicata com 25 larvas de quarto estágio em cada teste, com período de exposição de 24 horas.

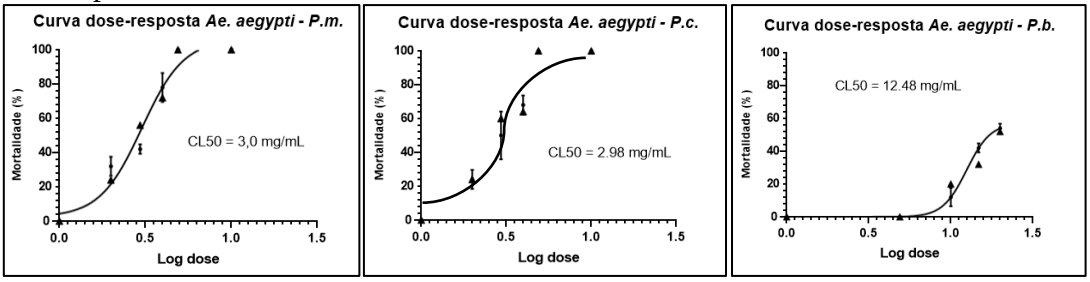
Os resultados obtidos para atividade larvicida dos extratos das três espécies de *Pavonia* frente as larvas (L4) de *Aedes aegypti*, estão apresentados na (Figura 226, pág. 263). No presente estudo, os Extratos Etanólicos Brutos (EEB) das partes aéreas de *P. malacophylla*, *P. cancellata* e *P. blanchetiana* apresentaram uma $CL_{50}$ 3,00 mg/mL, 2,98 mg/mL e 15,52 mg/mL, respectivamente (Figura 227, pág. 263).

**Figura 226.** Atividade larvicida dos extratos etanólicos brutos (EEB) de *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana* contra *Ae. aegypti* após 24 horas. CP = Controle Positivo, CN = Controle Negativo.




(*) Resultados diferem significativamente do controle negativo. (**) Resultados diferem significativamente do controle positivo.

**Figura 227.** Curva dose-resposta dos extratos etanólicos brutos (EEB) de *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana* contra *Ae. aegypti* após 24 horas, expressos em $CL_{50}$.



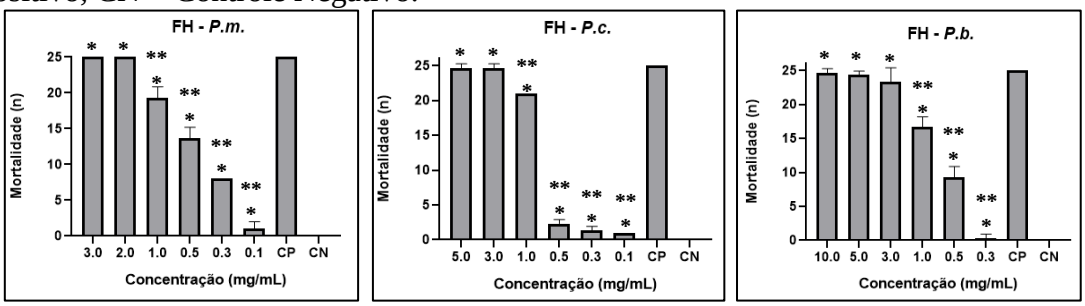

Um estudo anterior realizado por Fernandes et al. (2018) mostrou uma boa

atividade larvicida do EEB das partes aéreas de *Helicteres velutina* frente as larvas L4 do *Ae. aegypti*, apresentando $CL_{50}$ 2,98 mg/mL. Ao compararmos os resultados alcançados dos extratos das espécies de *Pavonia* com dados da literatura, a espécie *P. cancellata* apresentou semelhança com a atividade da espécie *P. malacophylla*, e ambas melhores que *P. blanchetiana* ($CL_{50}$ 2,98 mg/mL > 3,00 mg/mL > 15,52 mg/mL).

Uma pesquisa avaliando o potencial larvicida dos extratos clorofórmico, diclorometâmico e metanólico das folhas e raízes de seis espécies vegetais (*Aegle marmelos* L., *Balanites aegyptica* L., *Calotropis gigantica* L., *Murraya koenigii* L., *Nyctanthes arbor-tristis* L. e *Plumbago zeylanica* L.) mostrou moderada atividade frente às larvas L4 do *Ae. aegypti*, porém os extratos das raízes de *P. zeylanica* e *B. aegyptica* apresentaram melhores atividades com $CL_{50}$ 169,61 mg/L e 289,59 mg/L (PATIL et al., 2010).

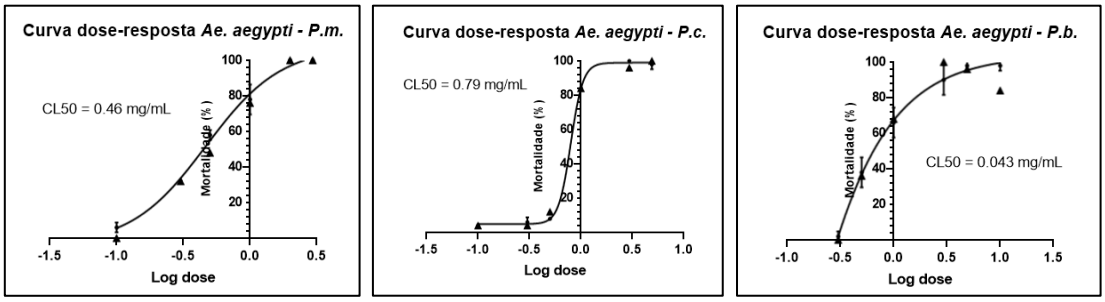
As fases hexânica, clorofórmica, acetato de etila, n-butanólica e hidroalcoólica de cada espécie de *Pavonia* foram obtidas dos seus respectivos extratos brutos a partir de cromatografias líquido-líquido que foram biomonitoradas com ensaios utilizando as larvas L4 do vetor, a fim de se buscar melhores potenciais bioativos de constituintes químicos nas amostras. Os resultados obtidos para atividade larvicida das fases hexânicas estão apresentados na (Figura 228, pág. 264).

**Figura 228.** Atividade larvicida das fases hexânicas de *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana* contra *Ae. aegypti* após 24 horas. CP = Controle Positivo, CN = Controle Negativo.




(*) Resultados diferem significativamente do controle negativo. (**) Resultados diferem significativamente do controle positivo.

**Figura 229.** Curva dose-resposta das fases hexânicas de *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana* contra *Ae. aegypti* após 24 horas, expressos em $CL_{50}$.

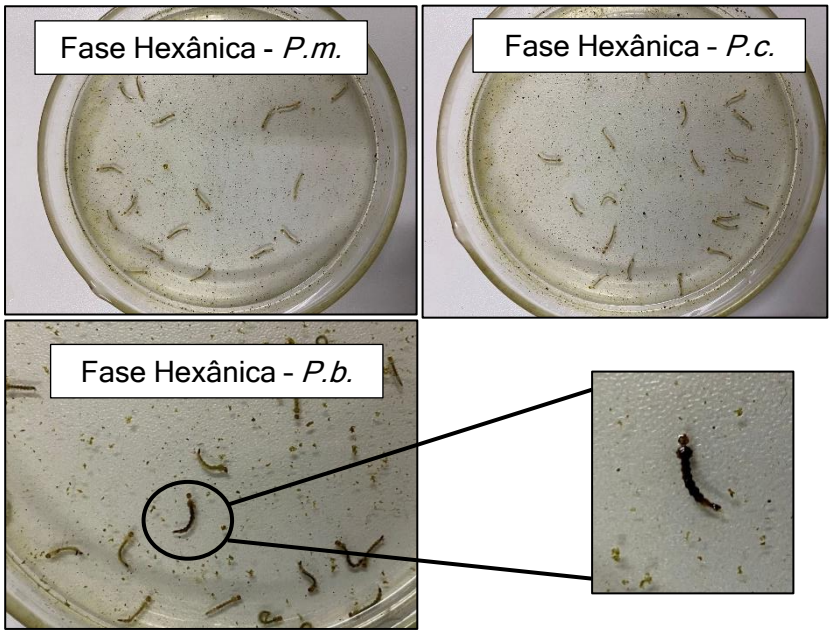



Como observado nos gráficos de barras, as três espécies (*Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana*) apresentaram melhor atividade, com valores de $CL_{50}$ 0,46 mg/mL, 0,79 mg/mL e 0,043 mg/mL, respectivamente (Figura 229, pág. 265). Essas concentrações foram inferiores quando comparadas com às $CL_{50}$ dos EEBs, sugerindo uma atividade sinérgica das substâncias existentes na composição das fases. Esses resultados também indicam que compostos de baixa polaridade desempenham papel central na toxicidade larvicida observada nos extratos vegetais avaliados.

Um estudo realizado com a fase hexânica das folhas de *Ocotea nutans* com as larvas L3 do mosquito *Ae. aegypti* também demonstrou alto potencial larvicida com $CL_{50}$ 14,14 μg/mL (BETIM et al., 2020). As fases obtidas com solventes apolares, especialmente hexano e clorofórmio, destacam-se por apresentar os menores valores de $CL_{50}$. Exemplos relevantes incluem a fase hexânica de *Anacardium occidentale*, que apresentou $CL_{50}$ inferior a 10 ppm (TORRES et al., 2015), e as fases hexânicas de *Annona muricata*, com valores aproximados de $CL_{50}$ 12,4 μg/mL (RODRIGUES et al., 2019).

Esses resultados indicam elevada toxicidade larvicida, possivelmente associada à presença de metabólitos secundários lipofílicos, como ácidos graxos, terpenoides, sesquiterpenos, diterpenos, esteroides, acetofenonas e compostos fenólicos de baixa polaridade capazes de atravessar a cutícula larval favorecendo a penetração e interferindo em processos fisiológicos essenciais, como respiração, neurotransmissão e integridade das membranas celulares (Figura 230, pág. 266) (SILVÉRIO et al., 2020).

**Figura 230.** Aspectos das larvas L4 após exposição por 24h, com as fases hexânica de cada espécie.

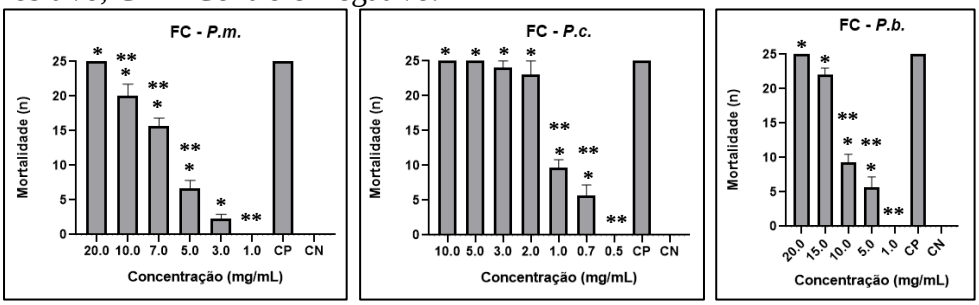



**Fonte:** Elaborado pelo autor (2026).

Resultados recentes reforçam esse padrão. A fração hexânica das folhas e caules de *Ocotea nutans* exibiram valores de $CL_{50}$ 111,32 µg/mL e 14,14 µg/mL, respectivamente. Enquanto a fração clorofórmica exibiu atividade $CL_{50}$ 441,40 µg/mL e 171,41 µg/mL, para suas folhas e caules. Embora ligeiramente menos potentes, esses valores ainda indicam atividade larvicida relevante (BETIM et al., 2021).

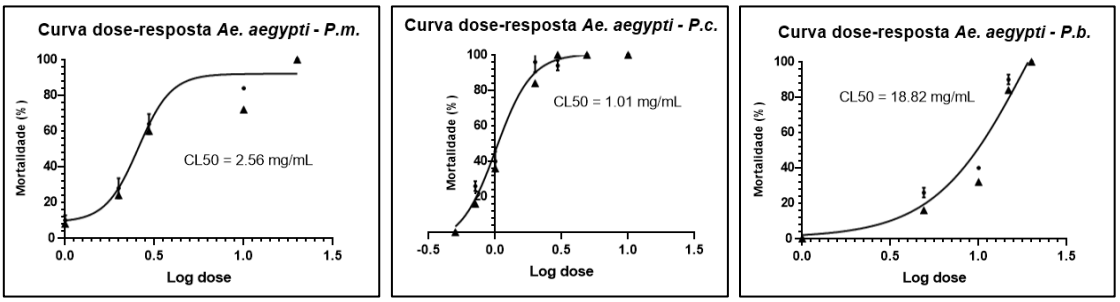
Os resultados obtidos para atividade larvicida das fases clorofórmicas das espécies de *Pavonia* estão apresentados na (Figura 231, pág. 266).

**Figura 231.** Atividade larvicida das fases clorofórmicas de *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana* contra *Ae. aegypti* após 24 horas. CP = Controle Positivo, CN = Controle Negativo.




(*) Resultados diferem significativamente do controle negativo. (**) Resultados diferem significativamente do controle positivo.

**Figura 232.** Curva dose-resposta das fases clorofórmicas de *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana* contra *Ae. aegypti* após 24 horas, expressos em $CL_{50}$.




Estudos sobre a atividade larvicida frente às fases clorofórmicas contra *Aedes aegypti* têm mostrado resultados consistentes de efeito tóxico sobre as larvas, embora a potência varie conforme a fonte vegetal. Como visto nos gráficos de $CL_{50}$ das espécies de *Pavonia*, apenas a *P. blanchetiana* apresentou uma concentração bem mais elevada ($CL_{50}$ 18,82 mg/mL), sendo necessário de uma dose maior para matar 50% das larvas em estágio L4. Enquanto isso as espécies *P. malacophylla* e *P. cancellata* apresentaram atividades de $CL_{50}$ 2,56 mg/mL e 1,01 mg/mL, respectivamente, tornando-se mais eficazes na atividade (Figura 232, pág. 267).

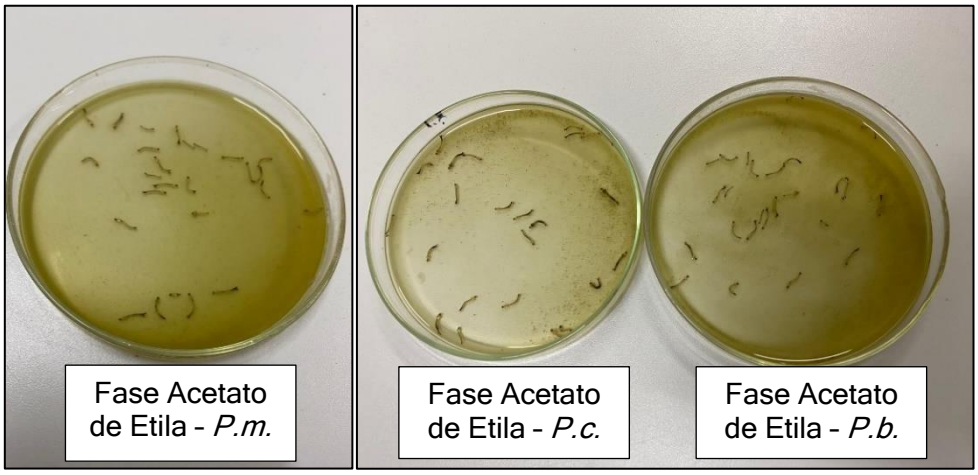
Outros estudos mostraram que o extrato clorofórmico de flores de *Annona muricata* apresentou $CL_{50}$ de 1244,04 ppm após 24 h de exposição, com mortalidade aumentando com a concentração do extrato, indicando atividade larvicida, mas em faixas relativamente elevadas de concentração (IZMEIR, 2014). Já em outro estudo com *Peltophorum pterocarpum*, a fase clorofórmica demonstrou $CL_{50}$ 170,74 ppm, ficando entre os extratos metanólico e hexânico quanto à sua eficácia contra larvas L4 de *A. Aegypti* (YAGOO et al., 2023).

Em estudos com extratos vegetais contra *Aedes aegypti*, a fase clorofórmica demonstrou importante atividade larvicida. Por exemplo, extratos de resina de *Commiphora myrrha* obtidos por extração com clorofórmio apresentaram mortalidade larval significativamente maior ($CL_{50}$ 118,33 ppm) do que extratos obtidos com metanol ($CL_{50}$ 127,67 ppm) ou acetona ($CL_{50}$ 142,13 ppm) nas mesmas concentrações, indicando que compostos menos polares são ainda mais eficientes na extração de princípios bioativos com ação larvicida (MASHLAWI et al., 2025).

A fase de polaridade intermediária, como acetato de etila (Figura 235, pág. 269) apresentou atividade larvicida moderada, com valores de $CL_{50}$ 2,02 mg/mL, 10,87 mg/mL e 15,79 mg/mL para as espécies *P. malacophylla*, *P. cancellata* e *P. blanchetiana*,

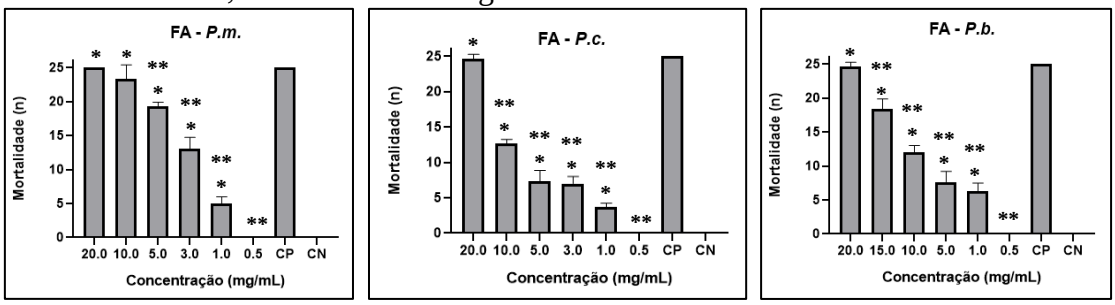
respectivamente (Figuras 233 e 234, pág. 269). Estudos com *Azadirachta indica* demonstraram que essas fases mantêm efeito larvicida expressivo, possivelmente relacionado à concentração de flavonoides, alcaloides e compostos fenólicos. Embora menos potentes que as frações apolares, essas fases apresentam interesse farmacológico por concentrarem metabólitos bioativos com menor volatilidade e maior estabilidade (ALMEIDA et al., 2020).

**Figura 233.** Aspectos das larvas após exposição por 24h com as fases mais polares do EEB.



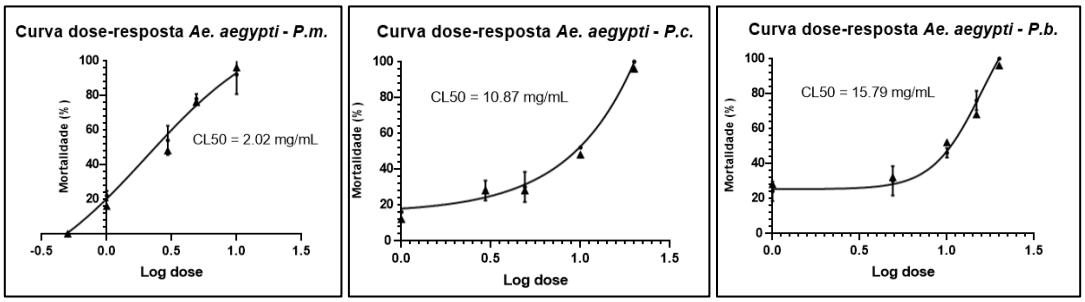

**Fonte:** Elaborado pelo autor (2026).

**Figura 234.** Atividade larvicida das fases acetato de etila de *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana* contra *Ae. aegypti* após 24 horas. CP = Controle Positivo, CN = Controle Negativo.



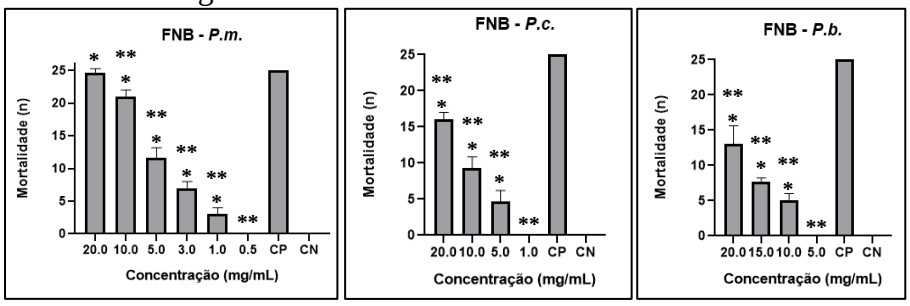

(*) Resultados diferem significativamente do controle negativo. (**) Resultados diferem significativamente do controle positivo.

**Figura 235.** Curva dose-resposta das fases acetato de etila de *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana* contra *Ae. aegypti* após 24 horas, expressos em $CL_{50}$.



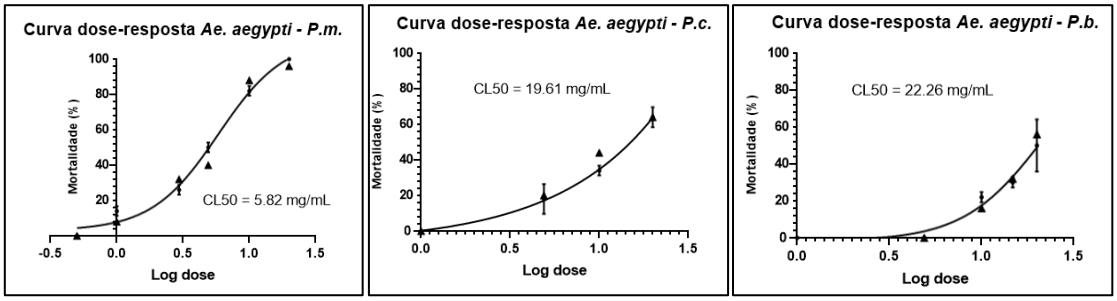

A fase de alta polaridade, n-butanólica de *P. malacophylla*, *P. cancellata* e *P. blanchetiana* apresentou concentrações de $CL_{50}$ 5,82 mg/mL, 19,61 mg/mL e 22,26 mg/mL, respectivamente com mortalidade mínima na concentração máxima (20,0 mg/mL) em 24 horas para as duas últimas plantas, necessitando de doses significativamente maiores do que as preconizadas para uma boa atividade larvicida (Figuras 236 e 237, pág. 270).

**Figura 236.** Atividade larvicida das fases n-butanólica de *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana* contra *Ae. aegypti* após 24 horas. CP = Controle Positivo, CN = Controle Negativo.




(*) Resultados diferem significativamente do controle negativo. (**) Resultados diferem significativamente do controle positivo.

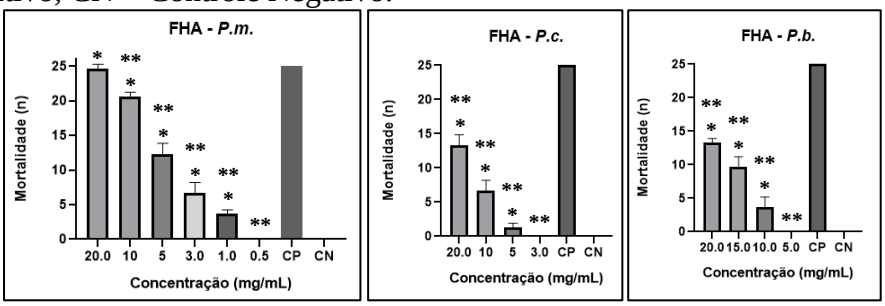
**Figura 237.** Curva dose-resposta das fases n-butanólica de *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana* contra *Ae. aegypti* após 24 horas, expressos em $CL_{50}$.



Por outro lado, as fases hidroalcoólicas exibiram, em geral, valores de $CL_{50}$ mais baixos do que a fase n-butanólica das espécies testadas, diferindo a concentração em *P. malacophylla* em $CL_{50}$ 0,72 mg/mL, enquanto as outras duas plantas apresentaram diferenças em quase 10 mg/mL das fases n-butanólicas, uma $CL_{50}$ 9,98 mg/mL para *P. cancellata* e $CL_{50}$ 12,48 mg/mL para *P. blanchetiana* (Figuras 238 e 239, pág. 271).

Apesar da menor potência larvicida, a espécie *P. malacophylla* ainda apresentou uma melhor atividade comparada às outras duas plantas, tornando esses extratos fundamentais como ponto inicial em estratégias de fracionamento guiado e permitindo a identificação das frações e compostos responsáveis pela toxicidade observada.

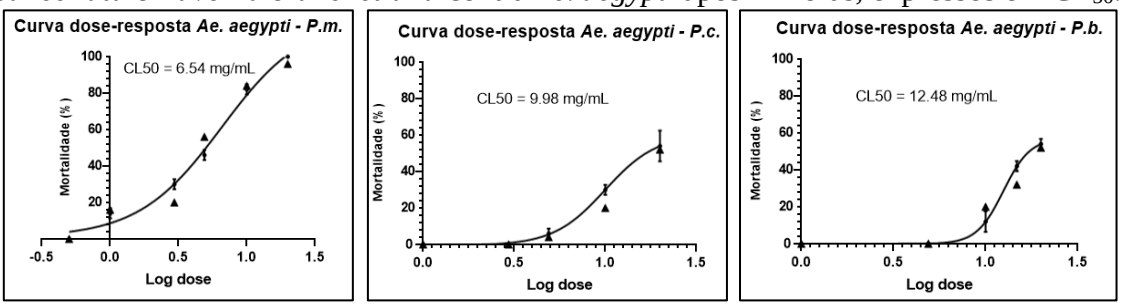
**Figura 238.** Atividade larvicida das fases hidroalcoólica de *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana* contra *Ae. aegypti* após 24 horas. CP = Controle Positivo, CN = Controle Negativo.




(*) Resultados diferem significativamente do controle negativo. (**) Resultados diferem significativamente do controle positivo.

As frações n-butanólica e hidroalcoólica apresentaram baixa atividade larvicida devido à polaridade elevada dos solventes, que extraem principalmente compostos hidrofílicos, menos tóxicos para o *Aedes aegypti*. Além disso, esses compostos polares (açúcares, taninos hidrolisáveis, saponinas e polifenóis) apresentam menor afinidade com a cutícula larval, reduzindo sua eficácia mesmo em concentrações relativamente altas (SILVÉRIO et al., 2020).

**Figura 239.** Curva dose-resposta das hidroalcoólica de *Pavonia malacophylla*, *Pavonia cancellata* e *Pavonia blanchetiana* contra *Ae. aegypti* após 24 horas, expressos em $CL_{50}$.



Além da potência larvicida, o destaque das frações apolares evidencia uma estratégia metodológica. A utilização de solventes como hexano e clorofórmio permite concentrar compostos ativos e reduzir a complexidade química do extrato, facilitando etapas posteriores de isolamento, identificação estrutural e avaliação toxicológica (SASIDHARAN et al., 2011).

Em síntese, os dados analisados confirmam que o fracionamento com solventes é uma etapa crucial na prospecção de larvicidas de origem vegetal contra *Aedes aegypti*. As frações apolares, especialmente as hexânicas e clorofórmicas, apresentaram as menores $CL_{50}$, indicando que compostos apolares desempenham papel central na atividade larvicida e constituem as frações mais promissoras dos extratos vegetais (SILVÉRIO et al., 2020).

Esses resultados reforçam o potencial de compostos naturais apolares como candidatos promissores ao desenvolvimento de biolarvicidas alternativos, especialmente em um contexto de crescente resistência aos inseticidas sintéticos e da necessidade de estratégias de controle vetorial mais sustentáveis. Além da eficácia, destaca-se que muitos desses compostos apresentam características como biodegradabilidade, o que contribui para a redução de impactos ambientais, minimizando processos de bioacumulação e biomagnificação ao longo das cadeias tróficas. Ademais, a diversidade de espécies vegetais investigadas ao longo da última década evidencia o valor da biodiversidade como uma fonte rica e estratégica de novos agentes para o controle de mosquitos vetores.

## 5.9 Avaliação da atividade larvicida das substâncias isoladas de *Pavonia cancellata* frente às larvas L4 de *Aedes aegypti* L.

Após a realização dos ensaios biológicos com os extratos e com as fases hexânica, clorofórmica, acetato de etila, n-butanólica e hidroalcoólica, bem como do estudo fitoquímico da espécie *Pavonia cancellata*, que resultou no isolamento e na caracterização estrutural de 24 substâncias durante o doutorado, foi conduzida uma avaliação preliminar dos flavonoides canferol, astragalina e tilirosídeo frente às larvas L4 de *Ae. aegypti*.

A escolha dos flavonoides supracitados para a realização dos ensaios larvicidas fundamentou-se na similaridade de suas estruturas químicas, uma vez que esses compostos compartilham o mesmo esqueleto flavonoídico, apresentando variações principalmente nos padrões de substituição e de glicosilação. Essas características

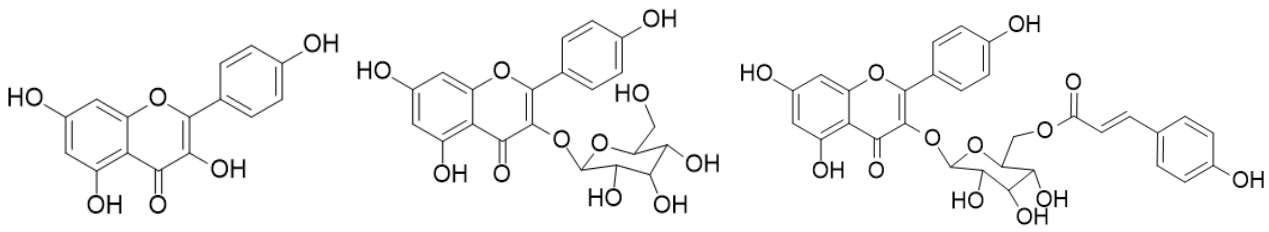
estruturais são reconhecidas por influenciar propriedades físico-químicas, como polaridade e lipofilicidade, as quais podem afetar a interação dos compostos com sistemas biológicos (MORAES et al., 2022).

Além disso, flavonoides estruturalmente relacionados têm sido amplamente descritos na literatura por apresentarem atividades biológicas semelhantes, incluindo efeitos inseticidas e larvicidas (PEREIRA; FIGUEIRA; CASTILHO et al., 2024). Dessa forma, a avaliação desses compostos frente às larvas de *Aedes aegypti* permitiu investigar a possível relação entre a estrutura química e a atividade larvicida, contribuindo para a compreensão do potencial desses metabólitos secundários como agentes bioativos de origem natural.

Para a avaliação da atividade larvicida dos flavonoides tilirosídeo, canferol e astragalina (Figura 240, pág. 272), utilizou-se como base metodológica a referência de Fernandes et al. (2019), que apresenta um protocolo padronizado para ensaios larvicidas em larvas de *Aedes aegypti*. Nesse estudo, o tilirosídeo apresentou atividade larvicida promissora na concentração de 1,0 mg/mL, atingindo mortalidade máxima após 72 h de exposição, o que justificou a escolha dessa concentração como parâmetro inicial para os ensaios realizados neste trabalho.

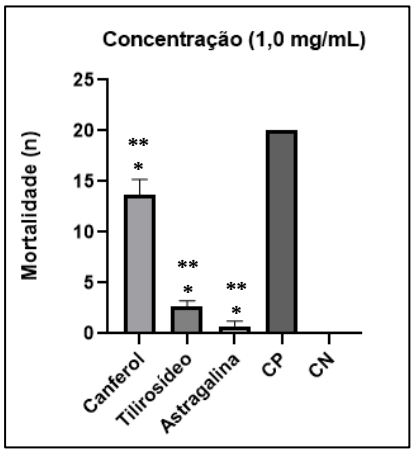
Com base nesses resultados, a concentração de 1,0 mg/mL foi adotada para a avaliação da atividade larvicida do tilirosídeo, bem como dos flavonoides canferol e astragalina, permitindo a comparação do potencial larvicida entre compostos estruturalmente relacionados. O procedimento experimental seguiu, de modo geral, as etapas descritas por Fernandes et al. (2019), incluindo a preparação das soluções de flavonoides, a exposição das larvas de *Aedes aegypti* aos tratamentos e a avaliação da mortalidade em diferentes períodos de incubação. Eventuais adaptações foram realizadas, quando necessário, visando garantir a solubilidade dos compostos e a padronização das condições experimentais, sem comprometer a reprodutibilidade dos ensaios.

**Figura 240.** Estruturas químicas dos flavonoides utilizados nos ensaios de atividade larvicida frente a *Aedes aegypti*.




(A) Canferol (B) Astragalina (C)Tilirosídeo

**Figura 241.** Gráfico de comparação da atividade larvicida do canferol, tilirosídeo e astragalina frente às larvas de *Aedes aegypti* após 24 h de exposição.




(*) Resultados diferem significativamente do controle negativo. (**) Resultados diferem significativamente do controle positivo.

Conforme apresentado na Figura 241 (pág. 273), o canferol destacou-se entre as substâncias avaliadas, apresentando a maior atividade larvicida frente às larvas de *Aedes aegypti* após 24 h de exposição. Em contraste, o tilirosídeo e a astragalina exibiram atividades inferiores nas mesmas condições experimentais, resultando na seguinte sequência decrescente de atividade larvicida: canferol > tilirosídeo > astragalina. Esses resultados indicam que tanto as características estruturais dos flavonoides quanto o tempo de exposição exercem influência significativa sobre a atividade larvicida observada.

A menor atividade do tilirosídeo no presente estudo pode ser explicada, ao menos em parte, pelo tempo de avaliação adotado. Diferentemente dos ensaios realizados neste trabalho, Fernandes et al. (2019) relataram mortalidade larval máxima para o tilirosídeo após 72 h de exposição, sugerindo que esse composto pode demandar um período mais prolongado para expressar seu potencial larvicida.

As diferenças na atividade larvicida entre canferol, astragalina e tilirosídeo estão relacionadas às variações estruturais desses flavonoides, que influenciam propriedades como lipofilicidade, polaridade e interação com alvos biológicos das larvas de *Aedes aegypti*. O canferol, por se apresentar na forma aglicona, possui maior lipofilicidade, o que favorece sua permeação pelas membranas larvais e resulta em maior toxicidade em curto tempo de exposição (PERIFERAKIS et al., 2022).

Em contraste, a astragalina, flavonoide glicosilado, apresenta maior polaridade, o que pode limitar sua absorção e reduzir sua atividade larvicida (KRAWCZYK-ŁEBEK et al., 2018). O tilirosídeo, embora apresente ligeiro aumento de lipofilicidade em relação

à astragalina, possui maior complexidade estrutural, o que pode dificultar sua absorção e interação com alvos biológicos, especialmente em períodos curtos de exposição (FERNANDES et al., 2020).

Esses resultados reforçam a relação estrutura-atividade, indicando que a ausência de glicosilação favorece a atividade larvicida do canferol, enquanto modificações estruturais como glicosilação e acilação modulam negativamente a eficácia larvicida dos flavonoides avaliados.

# 6. Conclusão



O estudo fitoquímico das partes aéreas de *Pavonia malacophylla* resultou no isolamento e na caracterização estrutural de dezoito substâncias, cujos resultados foram organizados e publicados na forma de um artigo científico, apresentado no Anexo 2, acrescidos de mais quatro substâncias derivadas do ácido cafeoilquínico: ***Pm*-1**, ***Pm*-2**, ***Pm*-3** e ***Pm*-4**, descritas pela primeira vez no gênero *Pavonia*.

O estudo fitoquímico das partes aéreas de *Pavonia cancellata* permitiu isolar e caracterizar estruturalmente, vinte e quatro substâncias que foram submetidas à análise espectral em RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ e, portanto, caracterizadas estruturalmente, como: mistura de dois esteroides (***Pc*-1a** e ***Pc*-1b**); mistura de um triterpeno (***Pc*-2a**) e dois esteroides (***Pc*-2b** e ***Pc*-2c**); três feofitinas (***Pc*-3, *Pc*-4a** e ***Pc*-4b**); três flavonoides metoxilados (***Pc*-5, *Pc*-6** e ***Pc*-7**); mistura de hidrocarbonetos (***Pc*-8a** e ***Pc*-8b**); um ácido graxo (***Pc*-9**); mistura de triterpenos (***Pc*-10a** e ***Pc*-10b**); um flavonoide tetrahidroxilado (***Pc*-11**); cinco flavonoides glicosilados (***Pc*-12, *Pc*-13, *Pc*-14a**, ***Pc*-14b** e ***Pc*-15**); um ácido fenólico (***Pc*-16**) e uma mistura das amidas fenilpropanoides (***Pc*-17a** e ***Pc*-17b**). As substâncias ***Pc*-1a**, ***Pc*-1b**, ***Pc*-2b**, ***Pc*-2c** e ***Pc*-12** foram re-isoladas da espécie, enquanto as demais são descritas pela primeira vez.

O estudo fitoquímico das partes aéreas de *Pavonia blanchetiana* possibilitou isolar e caracterizar estruturalmente, cinco flavonoides glicosilados (***Pb*-1, *Pb*-2, *Pb*-3, *Pb*-4 e *Pb*-5)** que também foram submetidos à análise espectral em RMN $^{1}H$ e $^{13}C$ e caracterizados estruturalmente, sendo estas substâncias inéditas na espécie em estudo.

Adicionalmente, a análise por espectrometria de massas permitiu a identificação de dez compostos na fase n-butanólica, além de duas substâncias adicionais identificadas na fase hidroalcoólica. Em conjunto, esses achados ampliam o conhecimento sobre o perfil metabólico das fases estudadas.

A atividade larvicida frente a *Aedes aegypti* demonstrou que as fases hexânicas apresentaram maior eficácia, com destaque para *P. blanchetiana*, que exibiu a menor $CL_{50}$ entre as amostras. De modo geral, os resultados indicam o potencial das espécies estudadas, especialmente de *P. malacophylla*, para o desenvolvimento de produtos naturais no controle do vetor.

A análise dos flavonoides revelou relação estrutura-atividade, sendo o canferol mais ativo devido à maior lipofilicidade, enquanto modificações como glicosilação reduziram a atividade. Esses achados reforçam o potencial da família como fonte de compostos bioativos para aplicações farmacológicas e biotecnológicas.

# 7. Referências

ABDELHADY, M. I. S.; KAMAL, A. M.; BARGHASH, M. F. POM analyses, immunomodulatory, cytotoxic activities and polyphenolic constituents of *Callistemon viridiflorus* fruits. ***Bulletin of Faculty of Pharmacy***, v. 56, n. 2, p. 175 178, 2018. DOI: 10.1016/j.bfopcu.2018.06.001.

ABU-REIDAH, I. M.; ALI-SHTAYEH, M. S.; JAMOUS, R. M.; ARRÁEZ-ROMÁN, D.; SEGURA-CARRETERO, A. HPLC–DAD–ESI-MS/MS screening of bioactive components from *Rhus coriaria* L. (Sumac) fruits. ***Food Chemistry***, v. 166, p. 179–191, 2015. DOI: http://dx.doi.org/10.1016/j.foodchem.2014.06.011

AGRA, M. de F.; FREITAS, P. F.; BARBOSA FILHO, J. M. Synopsis of the plants known as medicinal and poisonous in Northeast of Brazil. ***Revista Brasileira de Farmacognosia***, v. 17, n. 1, p. 114–140, 2007. DOI: 10.1590/S0102 695X2007000100021.

AJAEGBU, E. E.; ONAH, G. T.; IKUESAN, A. J.; BELLO, A. M. Synergistic potency and GC MS analysis of *Persea americana* extracts against *Aedes aegypti*. ***Scientific Reports***, v. 15, art. 33902, 30 set. 2025. DOI: 10.1038/s41598 025 08105 z.

AJOKU, G. A.; OKWUTE, S. K.; OKOGUN, J. I. Isolation of Hexadecanoic Acid Methyl Ester and 1,1,2 Ethanetricarboxylic Acid 1 Hydroxy 1,1 Dimethyl Ester from the Calyx of Green *Hibiscus sabdariffa* (Linn). ***Natural Product Chemistry & Research***, v. 3, n. 2, p. 1 5, 2015. DOI: 10.4172/2329 6836.1000169.

ALBUQUERQUE, J. B. L.; CHAVES, O. S. S.; QUEIROZ, W. A. M.; RODRIGUES, B. F. A.; FERNANDES, D. A.; SAMPAIO, F. C.; AGRA, M. F.; SOUZA, M. F. V. Phytochemical study from the aerial parts of *Pavonia malacophylla* (Malvaceae) and evaluation of its antimicrobial potential. ***Química Nova***, v. 48, p. 1-8, 2025. DOI: 10.21577/0100 4042.20250134.BRITO, 2025.

ALBUQUERQUE, J. B. L.; SILVA, C. M.; FERNANDES, D. A.; SOUZA, P. I. V.; SOUZA, M. F. V. *Pavonia* Cav. species (Malvaceae *sensu lato*) as source of new drugs: a review. ***Química Nova***, v. 45, n. 8, p. 977-993, 2022. DOI: http://dx.doi.org/10.21577/0100-4042.20170897

ALEYKUTTY, N. A.; AKHILA, S. Docking studies on identified constituents of *Helicteres isora* as antidiabetic agents. ***International Journal of Computer Applications***, New York, v. 45, n. 20, p. 8–13, 2012. DOI: 10.5120/7031-9437.

ALMEIDA, R. F. **Estudo químico e farmacológico de folhas da espécie de café *Coffea arabica*: isolamento de compostos bioativos e avaliação do potencial antioxidante, de inibição da enzima de conversão da angiotensina e de atividade anticolinesterásica.** 2017. 137 f. Tese (Doutorado em Química) — Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2017.

ALMEIDA, R. S. de; ARAÚJO, A. C. J.; FREITAS, P. R.; FERREIRA, V. A.; LEITE, P. I. P.; TINTINO, S. R.; OLIVEIRA-TINTINO, C. D. M.; COUTINHO, H. D. M.; FILHO, J. R.; OLIVEIRA COSTA, R. J. Antibacterial and larvicidal activity

of the extract of *Azadirachta indica* Juss. (Meliaceae). ***Revista Interfaces: Saúde, Humanas e Tecnologia***, v. 9, n. 1, p. 823–832, 2020. doi:10.16891/780.

ALSHARAIRI, N. A. Quercetin derivatives as potential therapeutic agents: an updated perspective on the treatment of nicotine-induced non-small cell lung cancer. ***International Journal of Molecular Sciences,*** v. 24, 15208, 2023. DOI: 10.3390/ijms242015208.

ANDRADE, T. U.; EWALD, B. T.; FREITAS, P. R.; LENZ, D.; ENDRINGER, D. C. *Pavonia alnifolia* A. St. Hil.: in vivo hypotensive effect and in vitro ace inhibitory activity. ***International Journal of Pharmacy and Pharmaceutical Sciences***, v. 04, n. 01, pp. 124-126, 2012.

APG I - Angiosperm Phylogeny Group classification for the orders and families of flowering plants: APG I. ***Missouri Botanical Garden Press***, v. 85, n. 04, pp. 531-553, 1998.

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

APG III - Angiosperm Phylogeny Group classification for the orders and families of flowering plants: APG III. ***Botanical Journal of the Linnaean Society***, v. 161, pp. 128-131, 2009.

APG IV - Angiosperm Phylogeny Group classification for the orders and families of flowering plants: APG IV. ***Botanical Journal of the Linnaean Society***, v. 181, pp. 01-20, 2016.

ARAÚJO, A. P.; MELO-SANTOS, M. A. V.; CARVALHO, S. O.; RIOS, E. M. M.; REGIS, L. Evaluation of an experimental product based on *Bacillus thuringiensis* sorovar israelensis against *Aedes aegypti* larvae (Diptera: Culicidae). ***Biological Control***, v. 41, p. 339-347, 2007.

ASSIS, E. B. **Estudo fitoquímico e abordagem sobre a atividade larvicida de *Helicteres eichleri* K. Schum (Sterculiaceae) frente a *Aedes aegypti* L. (Diptera: Culicidae).** Dissertação (Mestrado em Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos) - Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa/PB, 2019.

AYATOLLAHI, A. M.; GHANADIAN, M.; AFSHARYPUOR, S.; MESAİK, M. A.; ABDALLA, O. M.; SHAHLÆI, M.; FARZANDI, G.; MOSTAFAVI, H. Cycloartanes from *Euphorbia aellenii* Rech. f. and their antiproliferative activity. ***Iranian Journal of Pharmaceutical Research***, v. 10, n. 1, p. 105–112, 2011.

BAGHDADI, M. A.; AL ABBASI, F. A.; EL HALAWANY, A. M.; ASEERI, A. H.; AL ABD, A. M. Anticancer profiling for coumarins and related O-naphthoquinones from *Mansonia gagei* against solid tumor cells in vitro. ***Molecules***, v. 23, n. 5, art. 1020, 2018. DOI: 10.3390/molecules23051020.

BAJKO, E.; KALINOWSKA, M.; BOROWSKI, P.; SIERGIEJCZYK, L.;

LEWANDOWSKI, W. 5-O-Caffeoylquinic acid: A spectroscopic study and biological screening for antimicrobial activity. ***LWT – Food Science and Technology***, 2015.

BELLÉ, F. P. **Efeito larvicida dos extratos de *Eugenia uniflora* e *Urera baccifera* frente ao *Aedes aegypti* (Diptera, Culicidae).** 2017. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Farmácia) - Universidade Comunitária da Região de Chapecó, Chapecó, 2017.

BERTELLA, A.; SMADI, A.; BENHABROU, H.; SALVADOR, D.; WRONA, M.; OLIVEIRA, H.; SIDAOUI, A.; GAVRIL-LUMINITA, G.; PINTO, D. C. G. A.; OLEWNIK-KRUSZKOWSKA, E.; NERÍN, C.; SILVA, A. M. S.; BITAM, F. Phytochemical Study and In Vitro Antioxidant Activity of *Helianthemum cinereum* Along with Antitumor Activity of the Isolated trans-Tiliroside and Luteolin 4′-*O*-*β*-Xyloside. ***Molecules***, v. 29, n. 24, p. 5935, 2024. DOI: 10.3390/molecules29245935.

BETIM, F. C. M.; de OLIVEIRA, C. F.; MONTRUCCHIO, D. P.; MIGUEL, O. G.; MIGUEL, M. D.; MAURER, J. B. B.; DIAS, J. F. G. Preliminary evaluation of the larvicidal activity of extracts and fractions from *Ocotea nutans* (Nees) Mez against *Aedes aegypti*. ***Revista da Sociedade Brasileira de Medicina Tropical***, v. 54, 2021. DOI:10.1590/0037 8682 0576 2020.

BHATT, P.; SABEENA, S. P.; VARMA, M.; ARUNKUMAR, G. Current Understanding of the Pathogenesis of Dengue Virus Infection. ***Current Microbiology***, v. 78, p. 17-32, 2021. DOI: 10.1007/s00284-020-02284-w.

BLUNDER, M.; ORTHABER, A.; BAUER, R.; BUCAR, F.; KUNERT, O. Efficient identification of flavones, flavanones and their glycosides in routine analysis via off-line combination of sensitive NMR and HPLC experiments. ***Food Chemistry***, v. 218, p. 600-609, 2017. DOI: 10.1016/j.foodchem.2016.09.077.

BOLTON, G. Bladderwort: how a carnivorous plant could be used in mosquito control. ***Entomology Today***, Annapolis, 27 mar. 2024. Disponível em: https://entomologytoday.org/2024/03/27/bladderwort-carnivorous-plant-mosquito-biological-control/. Acesso em: 24 dez. 2025.

BOVINI, M. G.; CARVALHO OKANO, R. M.; VIEIRA, M. F. Malvaceae A. Juss. no Parque Estadual do Rio Doce, Minas Gerais, Brasil. ***Rodriguésia***, v. 52, n. 81, p. 17-47, 2001. DOI: 10.1590/2175 78602001528102.

BRASIL. Estratégia de combate ao *Aedes* com larvicida vira política nacional. ***Agência Brasil***, 2024. Disponível em: https://agenciabrasil.ebc.com.br/saude/noticia/2024-07/estrategia-de-combate-ao-aedes-com-larvicida-vira-politica-nacional. Acesso em: 4 jan. 2026.

BRASIL. MINISTÉRIO DA SAÚDE. Informe semanal de arboviroses, n. 01, 2025. Brasília: ***Ministério da Saúde***, 2025. Disponível em: https://www.gov.br/saude/pt-br/assuntos/saude-de-a-a-z/a/arboviroses/informe-semanal/2025/informe-semanal-no-01.pdf. Acesso em: 31 dez. 2025.

BRASIL. MINISTÉRIO DA SAÚDE. Monitoramento das arboviroses e balanço de encerramento do Comitê de Operações de Emergência (COE) Dengue e outras Arboviroses 2024. ***Boletim Epidemiológico***, Brasília, v. 55, n. 11, jul. 2024. Disponível em: https://www.gov.br/saude/pt-br/centrais-de-conteudo/publicacoes/boletins/epidemiologicos/edicoes/2024/boletim-epidemiologico-volume-55-no-11.pdf/view. Acesso em: 03 jan. 2026.

BRASIL. MINISTÉRIO DA SAÚDE. Secretaria de Vigilância em Saúde e Ambiente. Monitoramento das arboviroses e balanço de encerramento do Comitê de Operações de Emergência (COE) Dengue e outras Arboviroses 2024. ***Boletim Epidemiológico***, Brasília, v. 55, n. 11, jul. 2024. Disponível em: https://www.gov.br/saude/pt br/centrais de conteudo/publicacoes/boletins/epidemiologicos/edicoes/2024/boletim epidemiologico volume 55 no 11.pdf/view. Acesso em: 31 dez. 2025.

BRASIL. MINISTÉRIO DA SAÚDE. **Zika vírus**. Disponível em: https://www.gov.br/saude/pt-br/assuntos/saude-de-a-a-z/z/zika-virus. Acesso em: 10 jan. 2026

BRITO, T. A. M. **Investigação fitoquímica de *Metternichia princeps* J. C. Mikan (Solanaceae).** 166 f. Dissertação (Mestrado em Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos) – Centro de Ciências da Saúde, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, 2021.

BRITO-FILHO, S. G.; FERNANDES, M. G.; CHAVES, O. S.; CHAVES, M. C. O.; ARARUNA, F. B.; EIRAS, C.; LEITE, J. R. S. A.; AGRA, M. F; BRAZ-FILHO, R.; SOUZA, M. F. V. Chemical constituents isolated from *Turnera subulata* SM and electrochemical characterization of Phaeophytin b. ***Química Nova***, v. 37, p. 603-609, 2014.

BRITO-FILHO, S. G.; MACIEL, J. K. S.; TELES, Y. C. F.; FERNANDES, M. M. M. S.; CHAVES, O. S.; FERREIRA, M. D. L.; FERNANDES, P. D.; FELIX, L. P.; CIRINO, I. C. S.; SIQUEIRA-JÚNIOR, J. P.; BRAZ-FILHO, R.; SOUZA, M. F. V. Phytochemical study of *Pilosocereus pachycladus* and antibiotic-resistance modifying activity of syringaldehyde. ***Revista Brasileira de Farmacognosia***, v. 27, n. 04, p. 453-458, 2017.

BULAMA, J. S.; DANGOGGO, S. M.; HALILU, M. E.; TSAFE, A. I.; HASSAN, S. W. Isolation and Characterization of Palmitic Acid from Ethyl Acetate Extract of Root Bark of *Terminalia glaucescens*. ***Chemistry and Materials Research***, v. 6, n. 12, p. 140-144, 2014.

CAMPOS, D. M. O.; SILVA, M. K.; AZEVEDO, A. A. C.; OLIVEIRA, J. I. N. Avanços sobre o Zika vírus pós pandemia: uma revisão de literatura. ***Revista Médica de Minas Gerais***, Belo Horizonte, v. 31, e 31208, 23 set. 2021. DOI: 10.5935/2238 3182.20210054.

CAO LORMEAU, V. M.; BLAKE, A.; MONS, S.; LASTÈRE, S.; ROCHE, C.; VANHOMWEGEN, J.; DUB, T.; BAUDOUIN, L.; TEISSIER, A.; LARRE, P.; et al. Guillain Barré syndrome outbreak associated with Zika virus infection in French Polynesia: a case control study. ***The Lancet***, v. 387, n. 10027, p. 1531-1539, 2016. DOI: 10.1016/S0140 6736(16)00562 6.

CARREIRA, C. G. L. F. **Characterization of the phenolic composition of Rooibos (*Aspalathus linearis*).** RedEspresso of the system Delta Q. Lisboa, 2022. Disponível em: https://fenix.tecnico.ulisboa.pt/downloadFile/1126295043835125/Artigofinal_CFC.pdf

CASIMIRO-JÚNIOR, F.; CHAVES, O. S.; FERNANDES, M. M. M. S.; AGRA, M. F.; TELES, Y. C. F.; SOUZA, M. F. V. Substâncias Isoladas de *Pavonia cancellata* (L.) (Malvaceae). ***36ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química***, São Paulo/SP, Brasil, 2013.

CAVALCANTE, J. M. S.; NOGUEIRA, T. B. S. S.; TOMAZ, A. C. A.; SILVA, D. A.; AGRA, M. F.; CARVALHO, P. R. C.; RAMOS, S. R.; NASCIMENTO, S. C.; GONÇALVES-SILVA, T.; SOUZA, M. F. V. Steroidal and phenolic compounds from *Sidastrum paniculatum* (L.) Fryxell and evaluation of cytotoxic and anti-inflammatory activities. ***Química Nova***, v. 33, n. 04, p. 846-849, 2010.

CEDEÑO, H.; ESPINOSA, S.; ANDRADE, J. M.; CARTUCHE, L.; MALAGÓN, O. Novel flavonoid glycosides of quercetin from leaves and flowers of *Gaiadendron punctatum* G. Don. (Violeta de Campo), used by the Saraguro community in southern Ecuador, inhibit α-glucosidase enzyme. ***Molecules***, v. 24, n. 23, p. 4267, 2019. DOI: 10.3390/molecules24234267.

CHAVES, O. S. **Estudo fitoquímico e antimicrobiano de duas espécies de Malvaceae: *Pavonia malacophylla* (Link & Otto) Garcke e *Sida rhombifolia* L.** 2016. Tese (Doutorado em Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos) – Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa-PB, 2016.

CHAVES, O. S.; GOMES, R. A.; TOMAZ, A. C. A.; FERNANDES, M. G.; MENDES JUNIOR, L. G.; AGRA, M. F.; BRAGA, V. A.; SOUZA, M. F. V. Secondary Metabolites from *Sida rhombifolia* L. (Malvaceae) and the Vasorelaxant Activity of Cryptolepinone. ***Molecules***, v. 18, p. 2769-2777, 2013.

CHAVES, O. S.; TELES, Y. C. F.; BRITO FILHO, S. G.; OLIVEIRA, M. S.; AGRA, M. de F.; SOUZA, M. F. V. Primeiros flavonoides de *Pavonia malacophylla* (Link & Otto) Garcke. In: ***37ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química (SBQ)***, 37, Natal-RN, 2014.

CHAVES, O. S.; TELES, Y. C. F.; MONTEIRO, M. M. O.; MENDES-JUNIOR, L. G.; AGRA, M. F.; BRAGA, V. A.; SILVA, T. M. S.; SOUZA, M. F. V. Alkaloids and Phenolic Compounds from *Sida rhombifolia* L. (Malvaceae) and Vasorelaxant Activity of Two Indoquinoline Alkaloids. ***Molecules***, v. 22, n. 01, p. 01-09, 2017.

CHEMAM, Y.; BENAYACHE, S.; MARCHIONI, E.; ZHAO, M.; MOSSET, P.; BENAYACHE, F. On Line Screening, Isolation and Identification of Antioxidant Compounds of *Helianthemum ruficomum*. ***Molecules***, v. 22, n. 2, p. 239, 2017. DOI: 10.3390/molecules22020239.

CHEN, Z.-T.; LEE, S.-W.; CHEN, C.-M. Cucurbitacin B 2-sulfate and cucurbitacin

glucosides from the root bark of *Helicteres angustifolia*. ***Chemical & Pharmaceutical Bulletin***, v. 54, n. 11, p. 1605–1607, 2006. DOI: 10.1248/cpb.54.1605.

CHIN, Y. W.; JONES, W. P.; RACHMAN, I.; RISWAN, S.; KARDONO, L. B. S.; CHAI, H. B.; FARNSWORTH, N. R.; CORDELL, G. A.; SWANSON, S. M.; CASSADY, J. M.; KINGHORN, A. D. Cytotoxic lignans from the stems of *Helicteres hirsuta* collected in Indonesia. ***Phytotherapy Research***, Hoboken, v. 20, p. 62–65, 2006.

CHO, W. K.; LEE, W. K.; MA, J. Y. Antiviral Effect of Isoquercitrin against Influenza A Viral Infection via Modulating Hemagglutinin and Neuraminidase. ***International Journal of Molecular Sciences***, v. 23, n. 21, 13112, 2022. DOI: 10.3390/ijms232113112.

CORRÊA, W. R.; SERAIN, A. F.; NETTO, L. A.; MARINHO, J. V. N.; ARENA, A. C.; AQUINO, D. F. S.; KURAAOKA-OLIVEIRA, Â. M.; JÚNIOR, A. J.; BERNAL, L. P. T.; KASSUYA, C. A. L.; SALVADOR, M. J. Anti-Inflammatory and Antioxidant Properties of the Extract, Tiliroside, and Patuletin 3-O-β-D-Glucopyranoside from *Pfaffia townsendii* (Amaranthaceae). ***Evidence-Based Complementary and Alternative Medicine***, v. 2018, p. 1-14, 2018. DOI: 10.1155/2018/6057579.

COSTA, D. A.; CAVALCANTI, A. C.; SILVA, D. A. E.; CAVALCANTE, J. M. S.; MEDEIROS, M. A. A.; LIMA, J. T.; SILVA, B. A.; AGRA, M. F.; SOUZA, M. F. V. Chemical constituents from *Bakeridesia pickelii* (H. Monteiro) (Malvaceae) and the relaxant activity of kaempferol-3-O-β-D-(6´´-E-p-coumaroyl) glucopyranoside on guinea-pig ileum. ***Química Nova***, v. 30, n. 04, p. 901-903, 2007.

COSTA, D. A.; MATIAS, W. M.; LIMA, I. O.; XAVIER, A. L.; COSTA, V. B. M.; DINIZ, M. F. F. M.; AGRA, M. F.; BATISTA, L. M.; SOUZA, M. F. V.; SILVA, D. A. First secondary metabolites from *Herissantia crispa* L. (Brizicky) and the toxicity activity against *Artemia salina* Leach. ***Química Nova***, v. 32, n. 01, p. 48-50, 2009.

COUTO, J. F. O.; SIMAS, D. L. R.; SILVA, M. V. T.; BARTH, T.; PINTO, S. C.; TINOCO, L. W.; FREIRE, D. M. G.; MUZITANO, M. F.; LEAL, I. C. R. HSCCC Separations of Rutin Esters Obtained by Enzymatic Reaction Catalyzed by Lipase. ***Journal of the Brazilian Chemical Society***, v. 32, p. 523-533, 2021.

DADDAM, J. R.; KOTHA, P.; KATIKE, U.; BASHA, S.; DOWLATHABAD, M. R. An Ethnobotanical study of medicinal plants and traditional practices of ethnic people in Anantapur district, Andhra Pradesh, India. ***Research Square***, p. 01-27, 2020.

DANTAS, C. A. G. **Estudo fitoquímico e investigação da atividade imunomoduladora de metabólitos secundários de *Erythroxylum simonis* Plowman (Erythroxylaceae).** Dissertação (Mestrado em Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos) - Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa/PB, 2018.

DARMALI, L.; SILVA, C. B.; OCAMPOS, F. M. M.; BURCI, L. M.; NASCIMENTO, K. F.; JESUS, C.; DIAS, J. F. G.; DALLARMI, M. M.; GOMES, O. M.; ZANIN, S. M. W. Larvicidal activity of *Dalbergia brasiliensis* (Fabaceae-

Papilioideae) on *Aedes aegypti*. ***African Journal of Pharmacy and Pharmacology***, v. 9, n. 35, p. 881–885, 2015.

DEVI, S.; KUMAR, V. Comprehensive structural analysis of cis and trans tiliroside and quercetrin from *Malvastrum coromandelianum* and their antioxidant activities. ***Arabian Journal of Chemistry***, v. 13, n. 1, p. 1720-1730, jan. 2020. DOI: 10.1016/j.arabjc.2018.01.009.

DIÁRIO DO AÇO. **Fabricianense estuda método biológico de combate à dengue, 2024**. Disponível em: https://www.diariodoaco.com.br/noticia/0031485-fabricianense-estuda-metodo-biologico-de-combate-a-dengue. Acesso em: 4 jan. 2026.

DIAS, W. S.; AQUINO, A. K. S.; SILVA, J. B.; PEREIRA-JÚNIOR, P. G.; CARVALHO, E. K. C.; FERNANDES, M. M. M. S.; SOUZA, M. F. V.; TELES, Y. C. F. Metabólitos secundários e quantificação de fenólicos totais da espécie *Pavonia cancellata* (Malvaceae). ***III Simpósio Nordestino de Química***, 2017.

DONADEL, G.; DALMAGRO, M.; OLIVEIRA, J. A. B.; ZARDETO, G.; PINC, M. M.; HOSCHEID, J.; ALBERTON, O.; BELETTINI, S. T.; JACOMASSI, E.; JUNIOR, A. G.; LOURENÇO, E. L. B. Safety Investigations of Two Formulations for Vaginal Use Obtained from *Eugenia uniflora* L. Leaves in Female Rats. ***Pharmaceuticals***, v. 15, p. 1567-1580, 2022.

DONALISIO, M. R.; FREITAS, A. R. R.; ZUBEN, A. P. B. V. Arboviroses emergentes no Brasil: desafios para a clínica e implicações para a saúde pública. ***Revista de Saúde Pública***, 2017.

DU, T.; WANG, Y.; XIE, H.; LIANG, D.; GAO, S. Fragmentation Patterns of Phenolic C-Glycosides in Mass Spectrometry Analysis. ***Molecules***, v. 29, p. 2953, 2024. DOI: 10.3390/molecules29132953.

ESTEVES, G. L. *Pavonia* in Lista de Espécies da Flora do Brasil. **Jardim Botânico do Rio de Janeiro**, 2015. Disponível em: http://floradobrasil.jbrj.gov.br/jabot/floradobrasil/FB9118. Acesso em: 07 dez. 2025.

ESTEVES, G. L.; KRAPOVICKAS, A. Flora de Grão-Mogol, Minas Gerais: Malvaceae. ***Boletim de Botânica***, v. 27, n. 01, p. 63-71, 2009.

FELIPE, D. F.; SOUZA, J. M.; SANTOS, C. R.; OLIVEIRA, A. L.; PEREIRA, M. V.; ALMEIDA, C. S. Phytochemical analysis of *Pfaffia glomerata* inflorescences by LC-ESI-MS/MS. ***Molecules***, v. 19, p. 15720-15734, 2014. DOI: https://doi.org/10.3390/molecules191015720

FERNANDES, D. A.; BARROS, R. P. C.; TELES, Y. C. F.; OLIVEIRA, L. H. G.; LIMA, J. B.; SCOTTI, M. T.; NUNES, F. C.; CONCEIÇÃO, A. S.; SOUZA, M. F. V. Larvicidal compounds extracted from *Helicteres velutina* K. Schum (Sterculiaceae) evaluated against *Aedes aegypti* L. ***Molecules***, v. 24, n. 12, p. 2315, 2019.

FERNANDES, D. A.; RIQUE, H. L.; OLIVEIRA, L. H. G.; SANTOS, W. G. S.; SOUZA, M. F. V.; NUNES, F. C. Ovicidal, pupicidal, adulticidal, and repellent activity of *Helicteres velutina* K. Schum against *Aedes aegypti* L. (Diptera: Culicidae). ***Brazilian Journal of Veterinary Medicine***, v. 43, e112120, 2021.

FERNANDES, D. A.; SOUZA, M. S. R.; TELES, Y. C. F.; OLIVEIRA, L. H. G.; LIMA, J. B.; CONCEIÇÃO, A. S.; NUNES, F. C.; SILVA, T. M. S.; SOUZA, M. F. V. New Sulphated Flavonoids and Larvicidal Activity of *Helicteres velutina* K. Schum (Sterculiaceae). ***Molecules***, v. 23, n. 11, p. 2784, 2018.

FERNANDES, D. A. **Estudos fitoquímico e biológico de *Helicteres velutina* K. Schum (Sterculiaceae) nos estágios de desenvolvimento de *Aedes aegypti* L. (Diptera: Culicidae).** 2021. 248 f. Tese (Doutorado em Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos) - Centro de Ciências da Saúde, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, 2021.

FERNANDES, M. M. M. S. **Estudo fitoquímico pioneiro de *Pavonia cancellata* (L.) – Malvaceae.** Dissertação (Mestrado em Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos) - Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa/PB, 2013.

FERNANDO, L. M.; LIMA, A. A.; DIAS, W. S.; MOURA JÚNIOR, R. T.; TELES, Y. C. F.; SOUZA, M. F. V. Identificação de Tilirosídeo da espécie *Pavonia varians* Moric e avaliação por Docking molecular da sua interação com a enzima α-amilase. ***Processos Químicos e Biotecnológicos***, v. 05, 2020.

FERREIRA, M. D. L.; FERNANDES, D. A.; NUNES, F. C.; TELES, Y. C. F.; ROLIM, Y. M.; SILVA, C. M.; ALBUQUERQUE, J. B. L.; AGRA, M. F.; SOUZA, M. F. V. Phytochemical study of *Waltheria viscosissima* and evaluation of its larvicidal activity against *Aedes aegypti*. ***Revista Brasileira de Farmacognosia***, v. 29, p. 582-590, 2019.

FLORA DO BRASIL 2020. **Jardim Botânico do Rio de Janeiro**. Disponível em: http://floradobrasil.jbrj.gov.br/. Acesso em: 28 dez. 2025.

FRANÇA, L. P. **Avaliação da atividade larvicida de extratos e óleo essencial de *Piper capitarianum* Yunck, 1966 (Piperaceae) sobre *Aedes aegypti* Linnaeus, 1762 e *Anopheles* sp. (Culicidae) em laboratório.** 2015. Dissertação (Mestrado em Biotecnologia) – Universidade Federal do Amazonas, Manaus, AM, 2015.

FURTADO, L. G.; SOUZA, R. C.; VAN DEN BERG, M. E. ***Boletim do Museu Paraense Emílio Goeldi, Nova Série: Antropologia***, v. 70, p. 1, 1978.

GABRIEL, A. F. B.; ABE, K. C.; GUIMARÃES, M. de P.; MIRAGLIA, S. G. E. K. Avaliação de impacto à saúde da incidência de dengue associada à pluviosidade no município de Ribeirão Preto, São Paulo. ***Cadernos de Saúde Coletiva***, Rio de Janeiro, v. 26, n. 4, p. 446-452, out./dez. 2018. DOI: 10.1590/1414 462X201800040119.

GARCEZ, W. S.; GARCEZ, F. R.; SILVA, L. M. G. E.; SARMENTO, U. C. Substâncias de origem vegetal com atividade larvicida contra *Aedes aegypti*. ***Revista Virtual de Química***, v. 5, n. 3, p. 363–393, 2013. DOI: 10.5935/1984-6835.20130027.

GASCA, C. A.; CABEZAS, F. A.; TORRAS, L.; BASTIDA, J.; CODINA, C. Chemical composition and antioxidant activity of the ethanol extract and purified fractions of cadillo (*Pavonia sepioides*). ***Free Radicals and Antioxidants***, v. 3, p. 55-61, 2013.

GAVA, C.; SILVA, T. C. C.; LYRA, D. G. P.; ARDISSON, K. S.; MARQUES, C. S.; ALMADA, G. L.; CORRÊA, L. M. C.; SIQUEIRA, P. C.; RODRIGUES, G. A. P.; MOURA, L. de; CRUZ, O. G.; MACIEL, E. L. N.; CAMACHO, L. A. B. Prevenção e controle da febre amarela: avaliação de ações de vigilância em área indene no Brasil. ***Cadernos de Saúde Pública***, Rio de Janeiro, v. 38, n. 1, e00000521, 2022. DOI: https://doi.org/10.1590/0102 311X00000521.

GE, L.; WAN, H.; TANG, S.; CHEN, H.; LI, J.; ZHANG, K.; ZHOU, B.; FEI, J.; WU, S.; ZENG, X. Novel caffeoylquinic acid derivatives from *Lonicera japonica* Thunb. flower buds exert pronounced anti-HBV activities. ***RSC Advances***, v. 8, p. 35374-35385, 2018.

GHAVAM-HAGHI, F.; DINANI, M. S. Isolation and identification of astragalin and 2-methoxy tyrosol from the bulbs of *Allium paradoxum*. ***Journal of Herbmed Pharmacology***, v. 6, n. 3, p. 114-118, 2017.

GOMAA, A. A. R.; SAMY, M. N.; ABDEL BAKY, R. M.; DESOUKEY, S. Y.; KAMEL, M. S. Chemical Constituents of the Leaves of *Abutilon hirtum* and Their Antimicrobial Activity. ***Chemistry of Natural Compounds***, p. 368-370, 2022. DOI: 10.1007/s10600 022 03683 0.

GOMES, A. Y. S.; SOUZA, M. F. V.; CORTES, S. F.; LEMOS, V. S. Mechanism Involved in the Spasmolytic Effect of a Mixture of Two Triterpenes, Cycloartenol and Cycloeucalenol, Isolated from *Herissanthia tiubae* in the Guinea-Pig Ileum. ***Planta Medica***, v. 71, n. 11, p. 1025-1029, 2005.

GOMES, R. A.; RAMIREZ, R. R. A.; MACIEL, J. K. S.; AGRA, M. F.; SOUZA, M. F. V.; FALCÃO-SILVA, V. S.; SIQUEIRA-JUNIOR, J. P. Phenolic compounds from *Sidastrum micranthum* (A. St.-Hil.) Fryxell and evaluation of acacetin and 7,4′-di-O-methylisoscutellarein as modulator of bacterial drug resistance. ***Química Nova***, v. 34, p. 1385-1388, 2011.

GOMES, R. A.; TELES, Y. C. F.; PEREIRA, F. O.; RODRIGUES, L. A. S.; LIMA, E. O.; AGRA, M. F.; SOUZA, M. F. V. Phytoconstituents from *Sidastrum micranthum* (A. St.-Hil.) Fryxell (Malvaceae) and antimicrobial activity of pheophytin *a*. ***Brazilian Journal of Pharmaceutical Sciences***, v. 51, n. 4, p. 861-868, 2015.

GÓMEZ, M.; MARTINEZ, D.; MUÑOZ, M.; RAMÍREZ, J. D. *Aedes aegypti* and *Ae. albopictus* microbiome/virome: new strategies for controlling arboviral transmission? ***Parasites & Vectors***, v. 15, art. 287, 2022. DOI: 10.1186/s13071-022-05401-9.

GOTO, T.; TERAMINAMI, A.; LEE, J. Y.; OHYAMA, K.; FUNAKOSHI, K.; KIM,

Y. I.; HIRAI, S.; UEMURA, T.; YU, R.; TAKAHASHI, N.; KAWADA, T. Tiliroside, a glycosidic flavonoid, ameliorates obesity induced metabolic disorders via activation of adiponectin signaling followed by enhancement of fatty acid oxidation in liver and skeletal muscle in obese diabetic mice. ***The Journal of Nutritional Biochemistry***, v. 23, n. 7, p. 768-776, 2012. DOI: 10.1016/j.jnutbio.2011.04.001.

GUAÍRA. Fumacê não é solução para dengue, alerta diretor de Saúde. ***Prefeitura de Guaíra***, 2024. Disponível em: https://www.guaira.sp.gov.br/noticia/1956/fumace-nao-e-solucao-para-dengue-alerta-diretor-de-saude. Acesso em: 4 jan. 2026.

HARDIYANTI, R.; MARPAUNG, L.; ADNYANA, I. K.; SIMANJUNTAK, P. Isolation of Quercitrin from *Dendrophthoe pentandra* (L.) Miq Leaves and It's Antioxidant and Antibacterial Activities. ***Rasayan Journal of Chemistry***, v. 12, n. 4, p. 1822-1827, 2019. DOI: 10.31788/RJC.2019.1235353.

HERRIMAN, Robert. Brazil dengue cases down 75% in 2025. ***Outbreak News Today***, 25 dez. 2025. Disponível em: https://outbreaknewstoday.substack.com/p/brazil-dengue-cases-down-75-in-2025. Acesso em: 10 jan. 2026.

HONG, Y.; LIAO, X.; CHEN, Z. Determination of bioactive components in the fruits of *Cercis chinensis* Bunge by HPLC-MS/MS and quality evaluation by principal components and hierarchical cluster analyses. ***Journal of Pharmaceutical Analysis***, v. 11, p. 465–471, 2021.

IZMEIR, M. A. **Larvicidal effect of chloroform extract from *Annona muricata* Linn. flowers against *Aedes aegypti* larvae.** Trabalho de Conclusão de Curso (Skripsi) — Universitas Gadjah Mada, Yogyakarta, 2014. Disponível em: https://etd.repository.ugm.ac.id/penelitian/detail/68818. Acesso em: 17 dez. 2025.

JADULCO, R. C.; POND, C. D.; WAGONER, R. M. V.; KOCH, M.; GIDEON, O. G.; MATAINAHO, T. K.; PISKAUT, P.; BARROWS, L. R. 4-Quinolone Alkaloids from *Melochia odorata*. ***Journal of Natural Products***, v. 77, p. 183-187, 2014.

JANG, J. Y.; LE DANG, Q.; CHOI, Y. H.; CHOI, G. J.; JANG, K. S.; CHA, B.; LUU, N. H.; KIM, J. C. Nematicidal activities of 4 quinolone alkaloids isolated from the aerial part of *Triumfetta grandidens* against *Meloidogyne incognita*. ***Journal of Agricultural and Food Chemistry***, v. 63, n. 1, p. 68-74, 2015. DOI: 10.1021/jf504572h.

JEONG, C. H.; JEONG, H. R.; CHOI, G. N.; KIM, D. O.; LEE, U. K.; HEO, H. J. Neuroprotective and anti-oxidant effects of caffeic acid isolated from *Erigeron annuus* leaf. ***Chinese Medicine***, v. 6, p. 25, 2011.

JEONG, M.; JU, Y.; KWON, H.; KIM, Y.; HYUN, K. Y.; CHOI, G. E. Protocatechuic Acid and Syringin from *Saussurea neoserrata* Nakai Attenuate Prostaglandin Production in Human Keratinocytes Exposed to Airborne Particulate Matter. ***Current Issues in Molecular Biology***, v. 45, n. 7, p. 376, 2023. DOI: 10.3390/cimb45070376.

JIANG, H.; SOMOGYI, Á.; JACOBSEN, N. E.; TIMMERMANN, B. N.; GANG, D. R. Analysis of curcuminoids by positive and negative electrospray ionization and tandem mass spectrometry. ***Rapid Communications in Mass Spectrometry***, v. 20, p. 1001–1012, 2006. DOI: 10.1002/rcm.2401.

KHAN, A. K.; RASHID, R.; FATIMA, N.; MAHMOOD, S.; MIR, S.; KHAN, S.; JABEEN, N.; MURTAZA, G. Pharmacological Activities of Protocatechuic Acid. ***Acta Poloniae Pharmaceutica – Drug Research***, v. 72, n. 4, p. 643-650, 2015.

KIM, C. H.; KIM, J. E.; SONG, Y. J. Antiviral activities of quercetin and isoquercitrin against human herpesviruses. ***Molecules***, v. 25, n. 10, art. 2379, 20 maio 2020. DOI: 10.3390/molecules25102379.

KIM, H. J.; OH, S. H.; KIM, J. H. Antioxidant and anti-aging effects of quercetin 3-O-rhamnoside isolated from *Houttuynia cordata* Thunb extract on *Caenorhabditis elegans*. ***Free Radical Biology and Medicine***, v. 243, p. 143-156, 2025. DOI: 10.1016/j.freeradbiomed.2025.11.026.

KIM, S. B.; HWANG, S. H.; SUH, H. W.; LIM, S. S. Phytochemical Analysis of *Agrimonia pilosa* Ledeb., Its Antioxidant Activity and Aldose Reductase Inhibitory Potential. ***International Journal of Molecular Sciences***, v. 18, n. 2, p. 379, 2017. DOI: 10.3390/ijms18020379.

KUCZKOWIAK, U.; PETEREIT, F.; NAHRSTEDT, A. Hydroxycinnamic acid derivatives obtained from a commercial *Crataegus* extract and from authentic *Crataegus* spp. ***Scientia Pharmaceutica***, v. 82, p. 835-846, 2014.

KULIĆ, Ž.; STEINER, V. J. N.; BUTTERER, A. NMR Chemical Shifts of Common Flavonoids. ***Planta Medica***, 2025. DOI: 10.1055/a-2706-7473.

KUMAR, D.; SINGH, R. K.; FAROOQ, S. In vitro antimicrobial activity of oleanolic acid identified in chloroform extract of fruits of *Helicteres isora* L. ***World Journal of Pharmaceutical Research***, v. 6, p. 1102-1112, 2017.

LE, T. K. D.; HIOKI, Y.; NGUYEN, D. V.; LE, T. K. D.; NGUYEN, V. K.; DANG, T. T.; NGUYEN, T. A. T.; NGUYEN, T. H. T.; VU, T. H. D.; PHAM, T. K. N.; KITA, M.; CHAVASIRI, W. Identification and α-glucosidase inhibitory activity evaluation of two new coumarins derived from *Mansonia gagei* J. R. Drumm. ***Natural Product Research***, 2024. DOI: 10.1080/14786419.2024.2324367.

LEAL, C. M. B.; SIMAS, R. M.; COSTA, R. C.; LEITÃO, F. N.; RES., G. G. A New Tetraglycosylated Flavonoid from Leaves of *Platycyamus regnellii* Benth. Isolated by High Speed Countercurrent Chromatography. ***Journal of the Brazilian Chemical Society***, v. 30, n. 12, dez. 2019. DOI: 10.21577/0103-5053.20190143.

LEE, E. H.; PARK, H. J.; JUNG, H. Y.; KANG, I. K.; KIM, B. O.; CHO, Y. J. Isoquercitrin isolated from newly bred Green ball apple peel in lipopolysaccharide-stimulated macrophage regulates NF-κB inflammatory pathways and cytokines. ***3 Biotech***, v. 12, n. 4, p. 100, 2022. DOI: 10.1007/s13205-022-03118-1.

LEE, H. H.; CHO, J. Y.; MOON, J. H.; PARK, K. H. Isolation and Identification of Antioxidative Phenolic Acids and Flavonoid Glycosides from *Camellia japonica* Flowers. ***Horticulture, Environment and Biotechnology***, v. 52, n. 3, p. 270-277, 2011. DOI: 10.1007/s13580-011-0157-x.

LI, C.; HU, M.; JIANG, S.; LIANG, Z.; WANG, J.; LIU, Z.; WANG, H. M. D.; KANG, W. Evaluation procoagulant activity and mechanism of astragalin. ***Molecules***, v. 25, p. 177, 2020.

LI, X.; JIANG, Q.; WANG, T.; LIU, J.; CHEN, D. Comparison of the Antioxidant Effects of Quercitrin and Isoquercitrin: Understanding the Role of the 6″-OH Group. ***Molecules***, v. 21, n. 9, p. 1246, 2016. DOI: 10.3390/molecules21091246.

LIM, A.; SHEARER, F. M.; SEWALK, K.; PIGOTT, D. M.; CLARKE, J.; GHOUSE, A.; JUDGE, C.; KANG, H.; MESSINA, J. P.; KRAEMER, M. U. G.; GAYTHORPE, K. A. M.; DE SOUZA, W. M.; et al. The overlapping global distribution of dengue, chikungunya, Zika and yellow fever. ***Nature Communications***, v. 16, art. 3418, 2025. DOI: 10.1038/s41467-025-58609-5.

LIMA, B. A. T.; TELES, Y. C. F.; MONTEIRO, G.; SOUZA, M. F. V.; SILVA, C.; CHAVES, O. S. Análise Fitoquímica e quantificação dos fenólicos totais de *Pavonia malacophylla* (Link & Otto) Garcke. ***In: 3° Simpósio Nordestino de Química***, 2017.

LIMA, J. B.; CONCEIÇÃO, A. S. Malvoideae Burnett (Malvaceae) in the Environmental Protection Area Serra Branca, Raso da Catarina, Jeremoabo, Bahia, Brazil. ***Biota Neotropica***, v. 16, n. 4, e20160187, 2016. DOI: 10.1590/1676-0611-BN-2016-0187.

LIN, L.; ZHOU, H.; WEN, L.; AL-ROMAIMA, A.; et al. NMR-tracking for 15,16-seco-cycloartane triterpenes from *Cimicifuga acerina*. ***Phytochemistry***, v. 210, p. 113669, 2023. DOI: 10.1016/j.phytochem.2023.113669.

LIU, F.; MALLICK, S.; O'DONNELL, T. J.; ROUZIMAIMAITI, R.; LUO, Y.; SUN, R.; WALL, M.; WONGWIWATTHANANUKIT, S.; DATE, A.; SILVA, D. K.; WILLIAMS, P. G.; CHANG, L. C. Coumarinolignans with Reactive Oxygen Species (ROS) and NF-κB Inhibitory Activities from the Roots of *Waltheria indica*. ***Molecules***, v. 27, n. 10, p. 3270, 2022. DOI: 10.3390/molecules27103270.

LIU, H.; ZHANG, X.; WU, C.; WU, H.; GUO, P.; XU, X. Anti-hyperlipidemic caffeoylquinic acids from the fruits of *Pandanus tectorius* Soland. ***Journal of Applied Pharmaceutical Science***, v. 3, n. 8, p. 16-19, 2013.

LIU, Y.; SEERAM, N. P. Liquid chromatography coupled with time-of-flight tandem mass spectrometry for comprehensive phenolic characterization of pomegranate fruit and flower extracts used as ingredients in botanical dietary supplements. ***Journal of Separation Science***, 2018. DOI: 10.1002/jssc.201800480.

LOPES, M. C. F. **Ação inseticida dos inibidores de proteases presentes em plantas contra o *Aedes aegypti*: uma revisão bibliográfica.** 2022. Trabalho de Conclusão de

Curso – Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2022.

MA, H.; MA, Y.; LIU, X.; DYER, D. H.; XU, P.; LIU, K.; LAN, Q.; HONG, H.; PENG, J.; PENG, R. NMR structure and function of *Helicoverpa armigera* sterol carrier protein 2. ***Scientific Reports***, v. 5, p. 1-14, 2015. DOI: 10.1038/srep17692.

MACHADO, M. A.; ARAÚJO, V. E.; SEVERINO, V. G. P.; SEVERINO, R. P. Identificação estrutural e avaliação antioxidante de compostos fenólicos isolados de *Eriotheca pubescens* (Malvaceae). ***In: Obra acadêmica online***, 2016. Disponível em: https://files.cercomp.ufg.br/weby/up/803/o/Parte2.pdf. Acesso em: 30 dez. 2025.

MACIEL, J. K. S.; CHAVES, O. S.; BRITO-FILHO, S. G.; TELES, Y. C. F.; FERNANDES, M. G.; ASSIS, T. S.; ANDRADE, A. P.; FELIX, L. P.; SILVA, T. M. S.; RAMOS, N. S. M.; SILVA, G. R.; SOUZA, M. F. V. New alcamide and antioxidant activity of *Pilosocereus gounellei* A. Weber ex K. Schum. Bly. ex Rowl. (Cactaceae). ***Molecules***, v. 21, p. 11-23, 2016.

MARQUES, S. D. G.; FERNANDES, D. A.; TELES, Y. C. F.; MENEZES, R. P. B.; MAIA, M. S.; SCOTTI, M. T.; AGRA, M. F.; SILVA, T. M. S.; SOUZA, M. F. V. *Sidastrum paniculatum* (L.) Fryxell (Malvaceae): A Promising Source of Bioactive Sulfated Flavonoids Against *Aedes aegypti* L. ***Frontiers in Pharmacology***, v. 12, art. 760156, 2022.

MASHLAWI, A. M.; BOSLY, H.; ALSHAMMARI, A. N.; ALANAZI, N. A. H.; AKEEL, M. A.; ALHEJELY, A.; ALSHAMMARI, F. A.; JERAIBY, M. A.; ALKENANI, N. A.; SALAMA, S. A. Larvicidal effects and phytochemical analysis of myrrh, *Commiphora myrrha* extracts against *Aedes aegypti* L. ***International Journal of Molecular Sciences***, v. 26, n. 16, art. 8050, 2025. DOI: 10.3390/ijms26168050.

MATEOS, R.; BAEZA, G.; SARRIÁ, B.; BRAVO, L. Improved LC-MSn characterization of hydroxycinnamic acid derivatives and flavonols in different commercial mate (Ilex paraguariensis) brands. Quantification of polyphenols, methylxanthines, and antioxidant activity. ***Food Chemistry***, 2018. DOI: http://dx.doi.org/10.1016/j.foodchem.2017.08.085

MAZZOTTI, M. R. R. M. **Análise botânica e estudo fitoquímico pioneiro de *Pavonia glazioviana* Gurke: uma contribuição para a quimiotaxonomia da família Malvaceae.** Dissertação (Mestrado em Biodiversidade Vegetal) – Universidade do Estado da Bahia, Paulo Afonso/BA, 2015.

MEAD, P. S.; HILLS, S. L.; BROOKS, J. T. Zika virus as a sexually transmitted pathogen. ***Current Opinion in Infectious Diseases***, v. 31, n. 1, p. 39-44, 2018. DOI: 10.1097/QCO.0000000000000414.

MORAES, G. V.; JORGE, G. M.; GONZAGA, R. V.; SANTOS, D. A. Potencial antioxidante dos flavonoides e aplicações terapêuticas. ***Research, Society and Development***, v. 11, n. 14, e238111436225, 2022. DOI: 10.33448/rsd-v11i14.36225

MOREIRA, H. J. C.; BRAGANÇA, H. B. N. **Manual de Identificação de Plantas**

**Infestantes – Hortifrúti.** São Paulo: FMC Agricultural Products, 2011.

MOSTARDEIRO, C. P.; MOSTARDEIRO, M. A.; MOREL, A. F.; OLIVEIRA, R. M.; MACHADO, A. K.; LEDUR, P.; CADONÁ, F. C.; SILVA, U. F.; MÂNICA DA CRUZ, I. B. *Pavonia xanthogloea* (Ekman, Malvaceae): Phenolic compounds quantification, anti-oxidant and cytotoxic effect on human lymphocytes cells. ***Pharmacognosy Magazine***, v. 10, n. 39, p. 630-638, 2014.

MUKANDIWA, L.; ELOFF, J. N.; NAIDOO, V. Larvicidal activity of leaf extracts and seselin from *Clausena anisata* (Rutaceae) against *Aedes aegypti*. ***South African Journal of Botany***, v. 100, p. 169-173, 2016. DOI: 10.1016/j.sajb.2015.10.006.

NAPOLITANO, J. G.; LANKIN, D. C.; CHEN, S.; PAULI, G. F. Complete ^1H NMR Spectral Analysis of Ten Chemical Markers of *Ginkgo biloba*. ***Magnetic Resonance in Chemistry***, v. 50, n. 8, p. 569–575, 2012. DOI: 10.1002/mrc.3829.

NGUYEN, A. N. T.; VU, T. T. T.; DO, H. T. T.; NGUYEN, T. H.; LE, H. V.; PHAM, H. K. T.; TRUONG, P. C. H.; PHAM, D. P.; TRAN, M. H. Identification of phenolic compounds from Vietnamese artichoke (*Cynara scolymus* L.) leaf and their antioxidant activities. ***Natural Product Sciences***, v. 30, n. 1, p. 39–51, 2024. DOI: https://doi.org/10.20307/nps.2024.30.1.39

NHUNG, K. C.; BACH, T. T.; HUE, V. T.; HA, B. T.; THANH, L. N. Chemical Constituents and Biological Activities of *Commersonia bartramia* Stems. ***Tropical Journal of Natural Product Research***, v. 7, n. 6, p. 3147–3152, 2023. DOI: 10.26538/tjnpr/v7i6.13.

NOGUEIRA, M. L.; CINTRA, M. A. T.; MOREIRA, J. A.; PATIÑO, E. G.; BRAGA, P. E.; TENÓRIO, J. C. V.; et al. Efficacy and safety of Butantan DV in participants aged 2–59 years through an extended follow up: results from a double-blind, randomised, placebo-controlled, phase 3, multicentre trial in Brazil. ***Lancet Infectious Diseases***, v. 24, p. 1234–1244, 2024. DOI: 10.1016/S1473-3099(24)00376-1.

NOGUEIRA, T. B. S. S.; NOGUEIRA, R. B. S. S.; SILVA, D. A.; TAVARES, J. F.; LIMA, E. O.; PEREIRA, F. O.; et al. First Chemical Constituents from *Cordia exaltata* Lam and Antimicrobial Activity of Two Neolignans. ***Molecules***, v. 18, n. 9, p. 11086–11099, 2013.

NORONHA, T. G.; CAMACHO, L. A. B. Controvérsias sobre a ampliação das áreas com vacinação de rotina contra a febre amarela no Brasil. ***Cadernos de Saúde Pública***, v. 33, n. 10, 2018.

NUNES, F. C.; LEITE, J. A.; OLIVEIRA, L. H. G.; SOUSA, P. A. P. S.; MENEZES, M. C.; MORAES, J. P. S.; et al. The larvicidal activity of *Agave sisalana* against L4 larvae of *Aedes aegypti* is mediated by internal necrosis and inhibition of nitric oxide production. ***Parasitology Research***, v. 114, p. 543–549, 2015. DOI: 10.1007/s00436-014-4236-0.

OBI, J. O.; GUTIÉRREZ BARBOSA, H.; CHUA, J. V.; DEREDGE, D. J. Current

Trends and Limitations in Dengue Antiviral Research. ***Tropical Medicine and Infectious Disease***, v. 6, n. 4, p. 180, 2021. DOI: 10.3390/tropicalmed6040180.

OLDONI, T. L. C.; MERLIN, N.; BICAS, T. C.; PRASNIEWSKI, A.; CARPES, S. T.; et al. Antihyperglycemic activity of crude extract and isolation of phenolic compounds with antioxidant activity from *Moringa oleifera* Lam. leaves grown in Southern Brazil. ***Food Research International***, v. 141, p. 110082, 2021. DOI: 10.1016/j.foodres.2020.110082.

OLIVEIRA, C. S.; VASCONCELOS, P. F. C. Microcephaly and Zika virus. ***Journal of Pediatrics***, v. 92, p. 103-105, 2016.

OLIVEIRA, D. A.; ANGONESE, M.; GOMES, C.; FERREIRA, S. R. S. Valorization of passion fruit (*Passiflora edulis* sp.) by-products: Sustainable recovery and biological activities. ***Journal of Supercritical Fluids***, v. 111, p. 55–62, 2016.

OLIVEIRA, D. M.; BASTOS, D. H. M. Biodisponibilidade de Ácidos Fenólicos. ***Química Nova***, v. 34, n. 6, pp. 1051–1056, 2011.

OLIVEIRA, L. O. **Atividade antimalárica e inseticida de extratos de *Azadirachta indica* A. Juss. introduzida no município de Boa Vista, Roraima.** Dissertação (Mestrado em Bioprospecção) – Universidade Federal de Roraima, Boa Vista, RR, 2013.

OLIVEIRA, M. S.; CHAVES, O. S.; TELES, Y. C. F.; FERNANDES, D. A.; et al. Chemical constituents, antioxidant and antimicrobial activities of *Pavonia glazioviana* Gurke (Malvaceae). ***Química Nova***, v. 48, e20250011, p. 1–8, 2025. DOI: 10.21577/0100-4042.20250011.

ORGANIZAÇÃO PAN-AMERICANA DA SAÚDE; ***Organização Mundial Da Saúde***. Alerta epidemiológico – Febre amarela na Região das Américas, 26 de março de 2025. Washington, D.C.: OPAS/OMS, 2025. Disponível em: https://www.paho.org/sites/default/files/2025-03/2025-mar-26-phe-alerta-epidemiologica-febre-amarela-final-pt.pdf. Acesso em: 31 dez. 2025.

OSW, P. S.; HUSSAIN, F. H. S. Isolation of Kaempferol 3-O-Rutinoside from Kurdish Plant *Anchusa italica* Retz. and Bioactivity of Some Extracts. ***Eurasian Journal of Science and Engineering***, v. 6, n. 2, p. 141–156, 2020. DOI: 10.23918/eajse.v6i2p141.

PAN, M. H.; CHEN, C. M.; LEE, S. W.; CHEN, Z. T. Cytotoxic triterpenoids from the root bark of *Helicteres angustifolia*. ***Chemistry & Biodiversity***, v. 5, n. 4, p. 565–574, 2008. DOI: 10.1002/cbdv.200890053.

PATIL, S. V.; PATIL, C. D.; SALUNKHE, R. B.; SALUNKE, B. K. Larvicidal activities of six plant extracts against two mosquito species, *Aedes aegypti* and *Anopheles stephensi*. ***Tropical Biomedicine***, v. 27, n. 3, p. 360–365, 2010.

PAVIA, D. L.; LAMPMAN, G. M.; KRIZ, G. S.; VYVYAN, J. R. Introdução à espectroscopia. ***Cengage Learning***, 2015.

PEI, Y. G.; WU, Q. X.; SHI, Y. P. Triterpenoids and Other Constituents from *Euphorbia humifusa*. ***Journal of the Chinese Chemical Society***, v. 54, n. 6, p. 1565–1572, 2007. DOI: 10.1002/jccs.200700221.

PEREIRA, A. I. S.; PEREIRA, A. G. S.; LOPES SOBRINHO, O. P.; CANTANHEDE, E. K. P.; SIQUEIRA, L. F. S. Antimicrobial activity in fighting mosquito larvae *Aedes aegypti*: Homogenization of essential oils of linalool and eugenol. ***Educación Química***, v. 25, n. 4, p. 446–449, 2014.

PEREIRA, V.; FIGUEIRA, O.; CASTILHO, P. C. Flavonoids as insecticides in crop protection - A review of current research and future prospects. ***Plants***, v. 13, p. 776, 2024. Disponível em: https://doi.org/10.3390/plants13060776

PERIFERAKIS, A.; PERIFERAKIS, K.; BADARAU, I. A.; PETRAN, E. M.; POPA, D. C.; CARUNTU, A.; COSTACHE, R. S.; SCHEAU, C.; CARUNTU, C.; COSTACHE, D. O. Kaempferol: antimicrobial properties, sources, clinical, and traditional applications. ***International Journal of Molecular Sciences***, v. 23, p. 15054, 2022. Disponível em: https://doi.org/10.3390/ijms232315054

PERUMALSAMY, H.; JANG, M. J.; KIM, J. R.; KADARKARAI, M.; AHN, Y. J. Larvicidal activity and possible mode of action of four flavonoids and two fatty acids identified in *Millettia pinnata* seed toward three mosquito species. ***Parasites & Vectors***, v. 8, art. 237, p. 1–10, 2015. DOI: 10.1186/s13071-015-0848-8.

PHAM, T. M. T.; CUC LE, T. T.; TRAN, V. H.; NGUYEN, V. T. Isolation and Identification of Two Flavonoid Compounds from Acclimatized *Angelica acutiloba* Kitagawa Growing in Vietnam. ***World Journal of Traditional Chinese Medicine***, v. 8, n. 3, p. 413–416, Jul–Sep 2022. DOI: 10.4103/2311-8571.352471.

PHOOPHA, S.; WATTANAPIROMSAKUL, C.; PITAKBUT, T.; DEJ ADISAI, S. Chemical constituents of *Litsea elliptica* and their alpha glucosidase inhibition with molecular docking. ***Pharmacognosy Magazine***, v. 16, n. 70, p. 327–334, 2020. DOI: 10.4103/pm.pm_18_20.

PREMAMALINI, P.; SHARMILA, S. Ethnomedicinal Perspectives of Botanicals Used by the People of Pavalamalai, Gobi, Erode District, Tamil Nadu for Curing Various Ailments. ***International Journal of Advanced Herbal Science and Technology***, v. 3, pp. 67-75, 2017.

QIU, J.; YANG, X.; WANG, L.; ZHANG, Q.; MA, W.; HUANG, Z.; et al. Isoquercitrin promotes peripheral nerve regeneration through inhibiting oxidative stress following sciatic crush injury in mice. ***Annals of Translational Medicine***, v. 7, n. 22, p. 680, 2019. DOI: 10.21037/atm.2019.11.18.

QUEIROZ, G. S.; HELLER, M.; ARRUDA SILVA, F.; NASCIMENTO, M. V. P. S.; MICKE, G. A.; DALMARCO, E. M.; PIZZOLATTI, M. G.; BRIGHENTE, I. M. C. Antibacterial and anti-inflammatory activities of *Bunchosia armeniaca* (Cav.) DC. (Malpighiaceae). ***Records of Natural Products***, v. 9, n. 3, p. 419-431, 2015.

RABE, I. B.; HILLS, S. L.; HAUSSIG, J. M.; WALKER, A. T.; DOS SANTOS, T.; SAN MARTÍN, J. L.; GUTIÉRREZ, G.; MÉNDEZ RICO, J.; RODRÍGUEZ, J. C.; ELIZONDO LÓPEZ, D.; GONZALEZ ESCOBAR, G.; CHANDA, E.; AL ERYANI, S. M.; KODAMA, C.; YAJIMA, A.; KAKKAR, M.; KATO, M.; WIJESINGHE, P. R.; SAMARAWEERA, S.; BRINDLE, H.; TISSERA, H.; KELLEY, J.; LACKRITZ, E.; ROJAS, D. Recent epidemiology of Zika virus infection. ***American Journal of Tropical Medicine and Hygiene***, v. 112, n. 5, p. 1026-1035, 2025. DOI: 10.4269/ajtmh.24-0420.

RAMIRES, R. R. A.; GOMES, R. A.; TELES, Y. C. F.; AGRA, M. F.; SOUZA, M. F. V. Substâncias fenólicas de *Pavonia cancellata* (L.) (Malvaceae). ***In: XXI Simpósio de Plantas Medicinais do Brasil***, 2010.

RAMPRASAD, R.; ANIL, N.; SHAHUL HAMEED, S.; SHIFAMA, J. M. R.; VENKATESHAN, N. In-vitro antiurolithiatic activity of aqueous extract *Pavonia lasiopetala*. ***Journal of Drug Delivery & Therapeutics***, v. 9, n. 2, pp. 102-104, 2019.

RASMUSSEN, S. A.; JAMIESON, D. J.; HONEIN, M. A.; PETERSEN, L. R. Zika virus and birth defects – reviewing the evidence for causality. ***New England Journal of Medicine***, v. 374, n. 20, p. 1981-1987, 2016. DOI: 10.1056/NEJMsr1604338.

REFAAT, J.; SAMY, M. N.; DESOUKEY, S. Y.; RAMADAN, M. A.; SUGIMOTO, S.; MATSUNAMI, K.; KAMEL, M. S. Chemical constituents from *Chorisia chodatii* flowers and their biological activities. ***Medicinal Chemistry Research***, v. 24, n. 7, p. 2939-2949, 2015. DOI: 10.1007/s00044-015-1342-8.

RIBEIRO, D. A.; OLIVEIRA, L. G. S.; MACÊDO, D. G.; MENEZES, I. R. A.; COSTA, J. G. M.; SILVA, M. A. P.; LACERDA, S. R.; SOUZA, M. M. A. Promising medicinal plants for bioprospection in a Cerrado area of Chapada do Araripe, Northeastern Brazil. ***Journal of Ethnopharmacology***, v. 155, n. 3, p. 1522-1533, 2014. DOI: 10.1016/j.jep.2014.07.042.

RODRIGUES, A. M.; SILVA, A. A. S.; PINTO, C. C. C.; SANTOS, D. L.; FREITAS, J. C. C.; MARTINS, V. E. P.; MORAIS, S. M. Larvicidal and enzymatic inhibition effects of *Annona muricata* seed extract and main constituent annonacin against *Aedes aegypti* and *Aedes albopictus* (Diptera: Culicidae). ***Pharmaceuticals***, v. 12, n. 3, p. 112, 2019. DOI: 10.3390/ph12030112.

SAMPAIO, O. M.; LIMA, M. M. C.; VEIGA, T. A. M.; KING-DÍAZ, B.; SILVA, M. F. G. F.; LOTINA-HENNSEN, B. Evaluation of antidesmone alkaloid as a photosynthesis inhibitor. ***Journal of Agricultural and Food Chemistry***, v. 64, n. 49, p. 9353–9361, 2016. DOI: 10.1021/acs.jafc.6b04198.

SANTANA, A. L. C. M.; LIMA, G. C. ***Aedes aegypti*: ciclo de vida e arboviroses.** Teixeira de Freitas, BA: Universidade Federal do Sul da Bahia, 2021. Disponível em: https://ufsb.edu.br/proaf/images/SEPSE/documentos/cartilha_aedes_aegypti_ciclo_de_vida_e_arboviroses_vers%C3%A3o_final.pdf. Acesso em: 03 jan. 2026.

ŠANTIĆ, Ž.; PRAVDIĆ, N.; BEVANDA, M.; GALIĆ, K. The historical use of medicinal plants in traditional and scientific medicine. ***Psychiatria Danubina***, v. 5,

n. 1-2, p. 69-74, 2017.

SANTOS JÚNIOR, H. M.; LOPES, K. C.; ALVES, D. S.; CARVALHO, G. A.; OLIVEIRA, D. F. Ursolic acid and cis-tiliroside produced by *Merremia tomentosa* affect oviposition of *Leucoptera coffeella* on coffee plants. ***Química Nova***, v. 41, n. 3, p. 302-309, 2018. DOI: 10.21577/0100-4042.20170185.

SANTOS, E. A.; CARVALHO, C. M.; COSTA, A. L. S.; CONCEIÇÃO, A. S.; MOURA, F. B. P.; SANTANA, A. E. G. Bioactivity evaluation of plant extracts used in indigenous medicine against the snail, *Biomphalaria glabrata*, and the larvae of *Aedes aegypti*. ***Evidence-Based Complementary and Alternative Medicine***, v. 1, n. 1, p. 1-9, 2012.

SANTOS, H. C. **Fitoquímica e prospecção de princípios ativos em resíduos madeireiros de *Swietenia macrophylla* King.** Tese de Doutorado (Programa de Pós-Graduação em Química) – Universidade Federal do Amazonas, Manaus/AM, 2023.

SÃO VICENTE. **São Vicente elimina mais de 6 mil focos de *Aedes aegypti* em julho**. Prefeitura de São Vicente, 2025. Disponível em: https://www.saovicente.sp.gov.br/informacao/sao-vicente-elimina-mais-de-6-mil-focos-de-aedes-aegypti-em-julho. Acesso em: 04 jan. 2026.

SARAVANAN, P.; CHANDRAMOHAN, G.; MARIAJANCYRANI, J.; SHANMUGASUNDARAM, P. GC-MS analysis of phytochemical constituents in ethanolic bark extract of *Ficus religiosa* Linn. ***International Journal Pharmaceutical Sciences***, v. 6, pp. 457-460, 2014.

SASIDHARAN, S.; CHEN, Y.; SARAVANAN, D.; SUNDARAM, K. M.; YOGA LATHA, L.; et al. Extraction, isolation and characterization of bioactive compounds from plants' extracts. ***African Journal of Traditional, Complementary and Alternative Medicines***, v. 8, n. 1, p. 1-10, 2011.

ŞENER, S. Ö.; SUBAŞ, T.; KANBOLAT, Ş.; BADEM, M.; ÖZGEN, U.; TAMER, M.; KAPLAN, M. N.; SEZEN KARAOĞLAN, E. Quantitative HPLC analysis and isolation of tiliroside from *Alcea biennis* Winterl and determination of total flavonoid content and biological activities. ***Trakya University Journal of Natural Sciences***, v. 25, n. 1, p. 11-19, abr. 2024. DOI: 10.23902/trkjnat.1378819.

SILVA, D. A.; COSTA, D. A.; SOUZA, M. F. V.; AGRA, M. F.; MEDEIROS, I. A.; BARBOSA-FILHO, J. M.; BRAZ-FILHO, R. Flavonoides isolados de *Herissantia tiubae* (K. Shum) Brizicky (Malvaceae) e testes farmacológicos preliminares do canferol 3,7-di-O-α-L-ramnopiranosídeo. ***Revista Brasileira de Farmacognosia***, v. 15, n. 01, pp. 23-29, 2005.

SILVA, D. A.; FALCÃO-SILVA, V. S.; GOMES, A. Y. S.; COSTA, D. A.; LEMOS, V. S.; AGRA, M. F.; BRAZ-FILHO, R.; SIQUEIRA-JUNIOR, J. P.; SOUZA, M. F. V. Triterpenes and phenolic compounds isolated from the aerial parts of *Herissantia tiubae* and evaluation of 5,4'-dihydroxy-3,6,7,8,3'-pentamethoxy flavone as a modulator of bacterial drug resistance. ***Pharmaceutical Biology***, v. 47, n. 04, p. 279-284, 2009.

SILVA, D. A.; SILVA, T. M. S.; LINS, A. C. S.; COSTA, D. A.; CAVALCANTE, M. S. C.; MATIAS, W. N. M.; SOUZA, M. F. V.; BRAZ-FILHO, R. Constituintes químicos e atividade antioxidante de *Sida galheirensis* Ulbr. (Malvaceae). ***Química Nova***, v. 26, n. 06, pp. 1250-1254, 2006.

SILVA, J. P.; SESMA, A. F. Challenges on the development of a dengue vaccine: a comprehensive review of the state of the art. ***Journal of General Virology***, Cambridge, v. 104, n. 3, art. 001831, mar. 2023. DOI: 10.1099/jgv.0.001831.

SILVA, M. R. M. ***Malvaceae* s.l. Juss. da Serra Negra, Minas Gerais, Brasil**. Dissertação (Mestrado em Ecologia Aplicada ao Manejo e Conservação de Recursos Naturais) – Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora/MG, 2014.

SILVA, N. M.; TEIXEIRA, R. A. G.; CARDOSO, C. G.; SIQUEIRA JUNIOR, J. B.; COELHO, G. E.; OLIVEIRA, E. S. F. Vigilância de chikungunya no Brasil: desafios no contexto da Saúde Pública. ***Epidemiologia e Serviços de Saúde***, Brasília, v. 27, n. 3, 2018.

SILVA, T. M. S.; CARVALHO, M. G. de; BRAZ-FILHO, R. Estudo espectroscópico em elucidação estrutural de flavonoides de *Solanum jabrense* Agra & Nee e *S. paludosum* Moric. ***Química Nova***, v. 32, n. 5, p. 1119-1128, 2009. DOI: 10.1590/S0100-40422009000500008.

SILVÉRIO, M. R. S.; ESPINDOLA, L. S.; LOPES, N. P.; VIEIRA, P. C. Plant natural products for the control of *Aedes aegypti* mosquito: the main vector of important arboviruses. ***Molecules***, v. 25, n. 15, p. 3484, 2020. DOI: 10.3390/molecules25153484.

SILVERSTEIN, R. M.; WEBSTER, F. X.; KIEMLE, D. J. ***Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos.*** 7ª ed. LTC, 2005.

SINGARAPU, K. K.; RADEK, J. T.; TONELLI, M.; MARKLEY, J. L.; LAN, Q. Differences in the structure and dynamics of the apo- and palmitate-ligated forms of *Aedes aegypti* sterol carrier protein 2 (AeSCP-2). ***JBC Papers in Press***, 2010.

SINHA, S.; SINGH, K.; RAVI KUMAR, Y. S.; ROY, R.; PHADNIS, S.; MEENA, V.; BHATTACHARYYA, S.; VERMA, B. Dengue virus pathogenesis and host molecular machineries. ***Journal of Biomedical Science***, v. 31, art. 43, 22 abr. 2024. DOI: 10.1186/s12929-024-01030-9.

SOBEH, M.; PETRUK, G.; OSMAN, S.; EL RAEY, M. A.; IMBIMBO, P.; MONTI, D. M.; WINK, M. Isolation of Myricitrin and 3,5-di-O-Methyl Gossypetin from *Syzygium samarangense* and Evaluation of their Involvement in Protecting Keratinocytes against Oxidative Stress via Activation of the Nrf-2 Pathway. ***Molecules***, v. 24, p. 1839, 2019. DOI: 10.3390/molecules24091839.

SOBREIRA, A. L. C. **Estudo fitoquímico das espécies *Sida acuta* e *Sida linifolia* (Malvaceae) e avaliação antitumoral de nanoemulsão contendo tilirosídeo.** Tese de Doutorado (Programa de Pós-Graduação em Desenvolvimento e Inovação

Tecnológica em Medicamentos) – Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa/PB, 2023.

SOUSA, G. F. **Estudo fitoquímico do extrato hexânico e da atividade biológica de constituintes das folhas de *Maytenus robusta* (Celastraceae).** Dissertação (Mestrado em Química) – Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2012.

SOUZA, R. B. L.; SILVA, J. P.; ALMEIDA, C. S.; PEREIRA, M. V.; FERNANDES, M. M. M. de S. Dereplication-guided isolation of a new flavonoid triglycoside from *Macroptilium martii* and its cytotoxicity evaluation. ***Phytochemistry Letters***, v. 39, p. 144-150, 2020a. DOI: https://doi.org/10.1016/j.phytol.2020.08.001

SOUZA, T. A.; RODRIGUES, G. C. S.; SOUZA, P. H. N.; ABREU, L. S.; PEREIRA, L. C. O.; SILVA, M. S.; TAVARES, J. F.; SCOTTI, L.; SCOTTI, M. T. Mass spectrometry-based investigation of sugarcane exposed to five different pesticides. ***Life***, v. 13, 1034, 2023.

SOUZA, T. M.; FARIAS, D. F.; SOARES, B. M.; VIANA, M. P.; LIMA, G. P. G.; MACHADO, L. K. A.; MORAIS, S. M.; CARVALHO, A. F. U. Toxicity of Brazilian plant seed extracts to two strains of *Aedes aegypti* (Diptera: Culicidae) and nontarget animals. ***Entomological Society of America***, v. 48, n. 4, p. 846–851, 2011.

STEVENS, P. F. **Angiosperm Phylogeny Website**. Version 14, 2017. Disponível em: http://www.mobot.org/MOBOT/research/APweb/. Acesso em: 09 jan. 2022.

TABARI, M. A. K.; IRANPANAH, A.; BAHRAMSOLTANI, R.; RAHIMI, R. Flavonoids as promising antiviral agents against SARS-CoV-2 infection: a mechanistic review. ***Molecules***, v. 26, p. 3900, 2021.

TAVAKOLI, S.; KHALIGHI SIGAROODI, F.; KHOSRAVI DEHAGHI, N.; YAGHOOBI, M.; HAJIAGHAEE, R.; GHOLAMI, A.; GHAFARZADEGAN, R. Isolation and purification of apigenin, quercetin and apigenin 7-O-glycoside from *Apium graveolens* L., *Petroselinum crispum* (Mill.) Fuss, *Allium cepa* L., respectively. ***Journal of Medicinal Plants***, v. 21, n. 83, p. 72–86, 2022. DOI: 10.52547/jmp.21.83.72.

TEETHAISONG, Y.; WIN, H. H.; THUMMAVONGSA, T.; SANITHI, M.; GORANTLA, J. N.; KETUDAT CAIRNS, J. R.; et al. Identification of Protocatechuic acid as an anti-acne component in extracts of black rice bran. ***Scientific Reports***, v. 15, art. 21151, 1 jul. 2025. DOI: 10.1038/s41598-025-07396-6.

TELES, Y. C. F.; CHAVES, O. S.; AGRA, M. F.; BATISTA, L. M.; QUEIROZ, A. C.; ARAÚJO, M. V.; ALEXANDRE-MOREIRA, M. S.; BRAZ-FILHO, R.; SOUZA, M. F. V. Chemical constituents from *Sidastrum paniculatum* and evaluation of their leishmanicidal activity. ***Revista Brasileira de Farmacognosia***, 2015.

TELES, Y. C. F.; GOMES, R. A.; SILVA-OLIVEIRA, M.; LUCENA, K. L.; NASCIMENTO, J. S.; AGRA, M. F.; IGOLIC, J. O.; GRAY, A. I.; SOUZA, M. F. V. Phytochemical investigation of *Wissadula periplocifolia* (L.) C. Presl and

evaluation of its antibacterial activity. ***Química Nova***, v. 37, n. 9, p. 1491–1495, 2014.

THE PLANT LIST (2013). Versão 1.1. Publicado na Internet: http://www.theplantlist.org/ (Acessado em 03 Janeiro).

THIEN, T. V. N.; DO, L. T. M.; DANG, P. H.; HUYNH, N. V.; DANG, H. P.; NGUYEN, T. T.; TRAN, K. T.; HUU, D. M. N.; THAT, Q. T. A new lignan from the flowers of *Hibiscus sabdariffa* L. (Malvaceae). ***Natural Product Research***, 2019.

TORRES, R. C.; GARBO, A. G.; WALDE, R. Z. M. L. Characterization and bioassay for larvicidal activity of *Anacardium occidentale* shell waste fractions against dengue vector *Aedes aegypti*. ***Parasitology Research,*** v. 114, n. 10, p. 3699-3702, 2015. DOI: 10.1007/s00436-015-4598-5.

UAI. **As 3 melhores plantas contra mosquito da dengue em casa**. 26 jul. 2025. Disponível em: https://www.uai.com.br/uainoticias/2025/07/26/as-3-melhores-plantas-contra-mosquito-da-dengue-em-casa/. Acesso em: 04 jan. 2026.

WAN, C.; LI, S.; LIU, L.; CHEN, C.; FAN, S. Caffeoylquinic acids from the aerial parts of *Chrysanthemum coronarium* L. ***Plants***, v. 6, p. 10, 2017.

WAN, C.; YUAN, T.; CIRELLO, A. L.; SEERAM, N. P. Antioxidant and α-glucosidase inhibitory phenolics isolated from highbush blueberry flowers. ***Food Chemistry***, v. 135, n. 3, p. 1929-1937, 2012. DOI: 10.1016/j.foodchem.2012.06.056.

WORLD HEALTH ORGANIZATION (WHO). Dengue – Global situation. **Disease Outbreak News**, 30 May 2024. Disponível em: https://www.who.int/emergencies/disease-outbreak-news/item/2024-DON518. Acesso em: 03 jan. 2026.

WORLD HEALTH ORGANIZATION (WHO). **Guidelines for efficacy testing of spatial repellents. Control of neglected tropical diseases**. WHO Pesticide Evaluation Scheme. Geneva: WHO, 2013. 58 p.

YAGOO, A.; MILTON, M. C. J.; VILVEST, J.; IRINE, J. Mosquito larvicidal, pupicidal and ovidical effects of the different extracts of the leaves of *Peltophorum pterocarpum* against *Aedes aegypti* and *Culex quinquefasciatus*. ***Future Journal of Pharmaceutical Sciences***, v. 9, art. 32, p. 1-9, 2023. DOI: 10.1186/s43094-023-00483-3.

YANG, Z. G.; WEN, X. F.; LI, Y. H.; MATSUZAKI, K.; KITANAKA, S. Inhibitory effects of the constituents of *Hippophae rhamnoides* on 3T3-L1 cell differentiation and nitric oxide production in RAW264.7 cells. ***Chemical and Pharmaceutical Bulletin***, v. 61, n. 3, p. 279-285, 2013. DOI: 10.1248/cpb.c12-00835.

ZARA, A. L. S. A.; SANTOS, S. M.; FERNANDES-OLIVEIRA, E. S.; CARVALHO, R. G.; COELHO, G. E. Estratégias de controle do *Aedes aegypti*: uma revisão. ***Epidemiologia e Serviços de Saúde***, Brasília, v. 25, n. 2, p. 391-404, 2016.

ZHANG, L.; ZHANG, S.; YIN, Y.; XING, S.; LI, W.; FU, X. Hypoglycemic effect

and mechanism of isoquercitrin as an inhibitor of dipeptidyl peptidase 4 in type 2 diabetic mice. ***RSC Advances***, v. 8, p. 14967-14974, 2018. DOI: 10.1039/C8RA00675J.

ZHANG, X. L.; CHEN, Z. N.; HUANG, Q. F.; BAI, F. C.; NIE, J. L.; LU, S. J.; WEI, J. B.; LIN, X. Methyl helicterate inhibits hepatic stellate cell activation through modulation of apoptosis and autophagy. ***Cellular Physiology and Biochemistry***, v. 51, pp. 897-908, 2018.

# Anexo 1

*Quim. Nova,* Vol. 45, No. 8, 977-993, 2022 http://dx.doi.org/10.21577/0100-4042.20170897

Revisão

# *Pavonia* Cav. SPECIES (MALVACEAE *SENSU LATO*) AS SOURCE OF NEW DRUGS: A REVIEW

**Janderson Barbosa Leite de Albuquerque[a], Camila Macaúbas da Silva[a], Diégina Araújo Fernandes[a], Pedro Isaac Vanderlei de Souza[b] and Maria de Fátima Vanderlei de Souza[a,*]**

[a]Departamento de Ciências Farmacêuticas, Universidade Federal da Paraíba, 58051-900 João Pessoa – PB, Brasil
[b]Instituto de Biociências, Universidade Federal do Mato Grosso do Sul, 79070-900 Campo Grande – MS, Brasil

Recebido em 17/12/2021; aceito em 17/03/2022; publicado na web em 19/04/2022

*Pavonia* Cav., is a genus in the Malvaceae *sensu lato* family, containing 271 species with worldwide distribution, although with a higher diversity in America and Asia. Species from this genus are traditionally used in folk medicine with several biological activities, arousing scientific interest on the search for the substances responsible for such activities. This review aimed to provide and expand the scientific interest through phytochemical and pharmacological studies and the utilization of those plants in folk medicine. Species *P. odorata* and *P. zeylanica* are described in literature, specially at India, following the traditional medicine system Ayuverda, while the other species are studied mostly at Africa and America. There have been around 169 compounds isolated and characterized for such genus, most of them from the metabolic classes fat acids, terpenoids, flavonoids and phenolic compounds. Those species have shown *in vivo*, *in vitro* and *in silico* significant pharmacological activities, which include anti-inflammatory, analgesic, antimicrobial, cytotoxic, antitumoral, antidiabetic and antioxidant properties. Based on those informations, the search for new sources of plant based biologic prototypes with potential for the treatment of several diseases is of major scientific, economical and medicinal interest.

Keywords: *Pavonia* Cav.; ethnopharmacological relevance; natural products; biological studies.

## INTRODUCTION

Medicinal plants constitute the main therapeutic source of folk medicine. Traditional knowledges are passed through generations due to the stark believes that come since primitive folks and healers. Previous ethno-pharmaceutical-botanical studies form the foundation to the development of new drugs from medicinal herbs.[1]

Plants provide an essential economic role as they are used as a drug source.[2] This fact rises in developing countries due to lesser side effects and easy access that low-income populations have to those plants, making them an almost inexhaustible source of remedies for those people.[3]

Several chemical compounds that act as potential therapeutic agents have been isolated from plant species.[4] Studies about those compounds are based on ethnobotanical, chemical and pharmacological knowledges, aiming to find out new bioactive molecules. On this context, species from Malvaceae *sensu lato* family arouse major interests of the scientific community due to the fact that those species are important economic sources in agriculture, decorations, manufacturing, food and medicine.[5]

Among several genus belonging to Malvaceae *sensu lato*, we highlight *Pavonia* Cav., which has several biological and pharmacological activities described in literature about folk medicine. Those activities have been confirmed through the isolation, identification and characterization of secondary metabolites, as well as several pharmacological activities described for those compounds.[6]

The genus *Pavonia* Cav. includes approximately 271 species distributed worldwide, being more diverse in America and Africa, with only two species being recorded for Asia. A lot of chemical and pharmacological studies with species *P. odorata* and *P. zeylanica* are described in literature, mostly for India, due to the traditional medicine system Ayuverda.[7]

Approximately 224 species can be found in America, ranging from USA to Uruguay, including the Antilles and excluding Chile. In Africa, approximately 46 species can be found.[8] In Brazil, 136 species of *Pavonia* can be found, ranging from Amazon rainforest, Caatinga, Cerrado, Atlantic Forest, Pampas and Pantanal wetlands.[9]

Based on presented data, this review aims to accomplish a bibliographical survey about traditional uses of *Pavonia* species and evaluate the chemical and pharmacological potential of this genus in order to drive future researches based on natural products as a source of new drugs.

## METHODOLOGY

Information about the use of plants by folk medicine, phytochemical studies, botanic characteristics and pharmacological activities of genus *Pavonia* have been based and collected from scientific data banks such as: *'Web of Science'*, *'Scifinder'*, *'Pubmed'* and *'Scholar Google'*, using papers, books, dissertation and thesis from the year 1918 until April 2021 and searching for the keyword *'Pavonia'*. Following this methodology, we consulted 156 scientific articles, having, as inclusion criteria, the presence of information regarding the use of *Pavonia* genus in traditional medicine, phytochemical studies, pharmacological and/or biological activities. The exclusion criteria of the articles involved repetition of those in different databases, review articles that contained references used in the manuscript, information with the keyword *'Pavonia'* that do not concerns the genus, articles with only botanical data or articles not available for access on the platforms used. A single patent referring to the species *P. schiedeana* (JP 2001181172A (2001)) was found as part of a cosmetic composition.

The development of this revision paper aimed the study of this genus in order to expand the scientific interest through knowledge of isolated compounds with several biological activities, as those are the candidates to new drugs isolated from *Pavonia* species.

The present study and data have been extracted by the author (JBLA) and confirmed by other (DAF, CMS, PIVS, MFVS). All data are resumed in tables and their descriptions have been resumed as updated information.

*e-mail: mfvanderlei@ltf.ufpb.br

## RESULTS AND DISCUSSION

### Botanical description

*Pavonia* comprises species of herbs, shrubs and bushes. Its flowers are, generally, solitary, composed by four epicalyxes, several free bracteoles, a tubulous and cupuliform calyx composed by five petals, carpels uniovulate and stigma capitate (Figure 1). The fruits are schizocarp, formed by five mericarps with a nervous-reticulate dorsal face, smooth lateral faces and smooth or striated obovoid or reniform seeds.[10]

Some species of *Pavonia* possess floral nectaries formed by multicellular glandular trichomes, providing a thick area located near the internal base of calyx. This characteristic attracts hummingbirds, which are pollinators of tubulous flowers, such as *P. glazioviana*[11] and *P. multiflora*. Species that possesses flowers with twisted corolla and short staminal tube formed by free stamens, such as *P. malacophylla*, *P. varians*, *P. zeylanica* and *P. distinguenda*, are pollinated by bees.[12]

### Ethnopharmacological relevance

Different species of *Pavonia* Cav. are related in folk medicine as a treatment for several diseases. Among the most used parts of those plants used by some tribes in therapeutics are flowers, bark, roots, rhizomes and flowers (Table 1).

Juice of *P. odorata* leaves is used by traditional medicine Ayuverda as a treatment for dysentery, gonorrhea and halitosis, whereas leaves macerate as a paste are used as a treatment for rheumatism, foot infections and antipyretic.[13-18]

Powder from seeds of *P. senegalensis* is used as a contraceptive.[19] Decoct of *P. urens* roots is largely used as a treatment for toothache.[20,21] Brewing of roots and leaves of *P. zeylanica*, as well as decocts, powder and pastes are largely used by eastern communities as a treatment for osteoarthritis, joint pain, bone fractures, cough with discharge and healing of wounds.[22-26] Leaves' juice and the entire plant prepared as infusion are also used for its vermifuge and purgative properties.[27-30]

Several ethnopharmacological studies regarding *Pavonia* species have been described in literature, which give us basis for deepening the chemical and pharmacological knowledge of those herbs, since many of the pharmacological activities are related to traditional use of medicinal plants, therefore providing essential information to the development of new drugs.

### Chemical composition

Based on literature data, 29 references in the area of phytochemistry have been find to species of the genus *Pavonia*: 10 papers referred to species *P. odorata* (06) and *P. zeylanica* (04); 9 papers referred to species *P. malacophyla* (03), *P. glazioviana* (03) and *P. sepium* (03), and; 2 papers referred to *P. cancelatta*. Besides, several other papers have been related in this field with the species *P. varians*, *P. xanthogloea*, *P. sepioides*, *P. distinguenda*, *P. multiflora*, *P. hastata*, *P. lasiopetala*, *P. schiedeana* and *P. alnifolia*. 169 compounds have been isolated and/or identified in the genus *Pavonia* (Table 2), comprehending the most diverse classes of secondary metabolites ever related.

Fat acids, terpenoids, steroids, flavonoids, phenolics and other compounds such as pheophytins, hydrocarbons and volatile oils are some of the substances that can be found in the genus *Pavonia*. A broad profile of such compounds within has been detected in a study of the chemical composition of oils in the aerial parts of the species *Pavonia odorata* through hyphenated gas chromatography techniques coupled with mass spectrometry.[105] All compounds and their chemical structures are related in Table 2 and Figure 2, respectively.

#### *Fatty acids*

Fatty acids are molecule that consists of the most diverse lipids and, by enzymatic action, become free fatty acids, presenting powerful biological activities.[122]

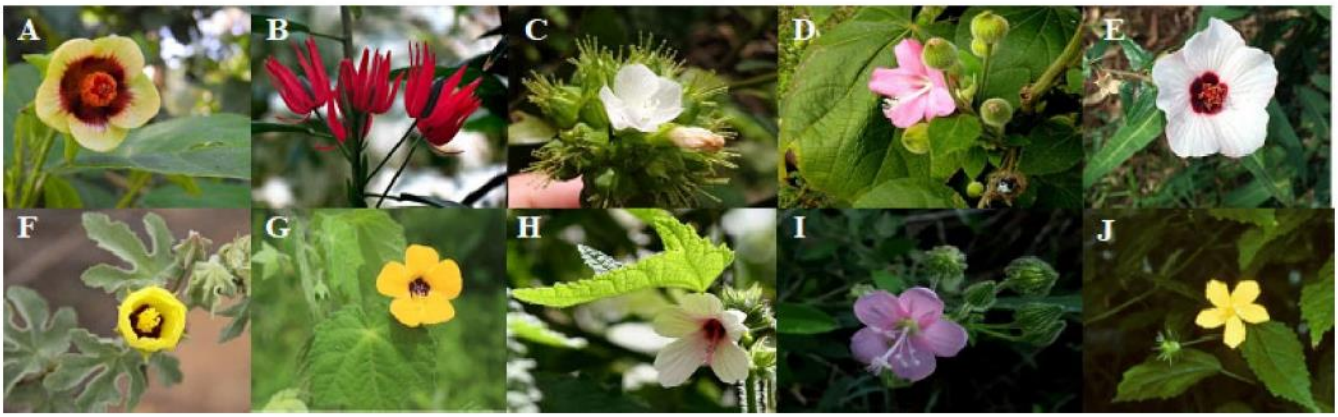



***Figure 1.*** *Pavonia plants. A) P. alnifolia, B) P. multiflora, C) P. fruticosa, D) P. malacophylla, E) P. hastata, F) P. varians, G) P. procumbens, H) P. urens, I) P. odorata, J) P. spinifex*

**Table 1.** Species of *Pavonia* genus and their uses in folk medicine

| Scientific name/ Popular name | Used plant part | Traditional Use | Therapeutic Properties | References |
|---|---|---|---|---|
| *Pavonia cancellata*/Malva-rasteira | LV | Poultice | Boils | 31 |
| *Pavonia distinguenda* | AP | * | Antitumor and antibacterial | 32 |
| *Pavonia fruticosa*/Anamu | WP | Decoction | Antipyretic and common cold | 33 |
| *Pavonia lasiopetala*/ Pavonia rosa | LV | * | Breaks and disintegrates kidney and urinary stones; Diuretic | 34 |

**Table 1.** Species of *Pavonia* genus and their uses in folk medicine (cont.)

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| | RH | * | Dysentery, anti-inflammatory, anti-hemorrhagic; Antipyretic, digestive and astringent | 35,36 |
| | RH and LV | * | Antipyretic, stomachic, dysentery and antiurolytic | 37,38 |
| | WP | * | Antipyretic, stomachic, dysentery; Rheumatism; Antiemetic; Anti-hemorrhagic; Demulcent, carminative, diaphoretic, diuretic, anti-inflammatory, spasmolytic and astringent | 29,39-45 |
| | ST and RT | * | Antipyretic | 7 |
| | ST | * | Bone fractures | 46 |
| | AP | * | Colds, diaphoretic, diuretic, demulcent; Antipyretic, anti-inflammatory and anti-hemorrhagic | 47-49 |
| *Pavonia odorata*/ Sugandhibala | * | * | Antipyretic, stomachic, dysentery; Anti-hemorrhagic; Skin diseases, anti-inflammatory, spasmolytic; Nervous weakness | 3,50-54 |
| | LV | Leaf juice | Dysentery; Gonorrhea; Anti-halitosis | 12-15 |
| | | Paste | Rheumatism; Foot infection, and antipyretic | 16,17 |
| | RT | * | Stomachache, anti-inflammatory, anti-hemorrhagic; Antipyretic, diuretic; Carminative, diaphoretic, polydipsia, burning when urinating, demulcent astringent, stomachic, haemorrhages from intestines; bleeding disorders, dysentery and antiulcerogenic; appetizer | 4,29,52,55-58 |
| | | Paste | Athlete's foot | 1,59 |
| | | Powder | Dislocations of bone joints; Osteoarthritis | 21,22 |
| | | Decoction | Dysentery and carminative | 60,61 |
| *Pavonia procumbens* | * | * | Antiulcerogenic, fumigation, vermifuge, analgesic and skin infections | 2,51,62-64 |
| | RT | Decoction | Retained placenta and prevention of miscarriage | 65 |
| *Pavonia schiedeana*/ Cadillo | RT and WP | Poultice | Antipyretic | 66 |
| | LV | Infusion | Hypoglycemic; retained placenta and prevention of miscarriage | 65,67 |
| | LV | Aqueous extract | Bone and soft tissue infections | 68,69 |
| *Pavonia senegalensis* | RT | Inhalation and infusion | Diarrhea and induce labour | 70,71 |
| | SD | Powder | Contraceptive | 18 |
| | FL | Infusion | Analgesic and skin problems | 72,73 |
| *Pavonia spinifex* | LV and TW | Infusion | Stomach problems, gallstones and liver pain | |
| | LV | * | Hepatoprotection, antioxidant, anticancer, antifungal and antibacterial | 74 |
| | AP | Inhalation and decoction | Antipyretic | 75 |
| | RT | * | Pneumonia and stomachic | 76,77 |
| *Pavonia urens* | | Decoction | Toothache | 19,20 |
| | LV | * | Boils | 78 |
| | | Smoke | Repellent for mosquitoes and house flies | 79-81 |
| *Pavonia varians*/ Malva-peluda | * | * | Infections of the digestive system, and anti-inflammatory | 82 |
| *Pavonia xanthogloea*/ Erva-de-ovelha | * | * | Antimicrobial and antitumor | 83,84 |
| | LV | * | Eczema; Eye diseases; Antipyretic, Anthelmintic, anti-inflammatory, analgesic, toothache; Dysentery, anti-hemorrhagic and emollient | 43,85-91 |
| | | Decoction | Cough with phlegm | 23 |
| *Pavonia zeylanica*/ Citramutti | | Ground | Constipation in animals | 92 |
| | | Paste | Bone fractures; Healing of acute and chronic wounds | 24,25 |
| | * | * | Skin diseases, anthelmintic, leprosy, scabies, ringworm, dermatitis, acne, wounds and antiulcerogenic; Blood circulation | 3,93 |

**Table 1.** Species of *Pavonia* genus and their uses in folk medicine (cont.)

| Scientific name/ Popular name | Medicinal Parts | Traditional Use | Therapeutic Properties | References |
|---|---|---|---|---|
| *Pavonia zeylanica*/ Citramutti | WP | Inhalation | Wound dressing | 94 |
| | | * | Antipyretic and anthelmintic; Paralysis; Joint pain | 4,95,96 |
| | | Infusion and leaf juice | Vermifuge and purgative | 26-29 |
| | RT | * | Demulcent, carminative, diaphoretic, diuretic, astringent, tonic, anti-hemorrhagic and anti-inflammatory; Antiulcerogenic | 88,97 |
| | | Powder | Dislocations of bone joints; Osteoarthritis | 21,22 |

* not reported in the literature. **AP**: Aerial Parts; **FL**: Flowers; **FR**: Fruits; **LV**: Leaves; **RH**: Rhizomes; **RT**: Roots; **SD**: Seeds; **ST**: Stems; **TW**: Twigs; **WP**: Whole Plant.

**Table 2**. Isolated compounds from *Pavonia* genus

| Nº | Name | Source | Reference |
|---|---|---|---|
| | **Fatty acids** | | |
| **1** | Malvalic acid | SD of *P.sepiu.* and *P.z.* | 98-101 |
| **2** | Sterculic acid | | |
| **3** | Palmitic acid | SD of *P.z.*, RT and AP of *P.o.* | 48,101-105 |
| **4** | Stearic acid | | |
| **5** | Oleic acid | | |
| **6** | Linoleic acid | | |
| **7** | Dihydrosterculic acid | SD of *P.z.* | 101 |
| **8** | (9Z,12Z,15Z)-9,12,15-Octadecatrienoic acid 2,3-*bis*(trimethylsilyloxy) propyl-ester | RT of *P.o.* | 48,102-104,106 |
| **9** | Isovaleric acid | | |
| **10** | Caproic acid | | |
| **11** | Dodecanoic acid | AP of *P.o.* | 105 |
| **12** | Methyl tetradecanoate | | |
| **13** | Tetradecanoic acid | | |
| **14** | Methyl-(2*E*,6*E*)-farnesate | | |
| **15** | Pentadecanoic acid | | |
| **16** | Methyl palmitate | | |
| **17** | Methyl linoleate | | |
| **18** | Methyl oleate | | |
| | **Terpenoids** | | |
| **19** | α-amirine | AP of *P.mal.* | 107 |
| **20** | β-amirine | | |
| **21** | Lupeol | AP of *P.mal.* and *P.d.* | 31,108 |
| **22** | Blumenol C | LV of *P.mul.* | 109 |
| **23** | Vomifoliol | | |
| **24** | 4,5-dihydroblumenol A | | |
| **25** | 3-oxo-α-ionol | | |
| **26** | Loliolide | | |
| **27** | Taraxerol *p*-methoxybenzoate | | |
| **28** | Cycloart-23Z-en-3β, 25-diol | AP of *P.g.* | 110 |
| **29** | Cycloart-25Z-en-3β, 24-diol | | |
| **30** | Taraxerol | AP of *P.d.* | 31 |
| **31** | Germanicol | | |
| **32** | Cedran-diol,8S,13 | RT of *P.o.* | 48,102-104,106 |
| **33** | Cedrol | | |
| **34** | S-guaiazulene | | |
| **35** | Pinocarveol | | |
| **36** | α-terpinene | | |
| **37** | Pavonenol* | | |
| **38** | β-pinene | | |
| **39** | *p*-cymene | | |
| **40** | 1,8-cineole | AP of *P.o.* | 105 |
| **41** | (*Z*)-linalooloxide | | |
| **42** | (*E*)-linalooloxide | | |
| **43** | Linalool | | |
| **44** | (*E*)-pinocarveol | | |
| **45** | Borneol | | |
| **46** | Menthol | | |
| **47** | Terpinen-4-ol | | |
| **48** | *p*-cymen-8-ol | | |
| **49** | α-terpineol | | |
| **50** | Carvone | | |
| **51** | Geraniol | | |
| **52** | Thymol | | |
| **53** | Eugenol | | |
| **54** | β-damascenone | | |
| **55** | β-caryophyllene | | |
| **56** | β-eudesmol | | |
| **57** | Muurolane | | |
| **58** | Farnesyl acetone | | |
| **59** | Phytol | | |
| **60** | β-caryophyllene oxide | | |
| **61** | Guaiol | | |
| **62** | γ-eudesmol | | |
| **63** | α-eudesmol | RT and AP of *P.o.* | 48,102-105 |
| **64** | α-pinene | | |
| | **Steroids** | | |
| **65** | Sitosterol-3-*O*-β-D-glucopyranoside | AP of *P.c.*, *P.mal.* and *P.g.* | 107,110-112 |
| **66** | Stigmasterol-3-*O*-β-D-glucopyranoside | | |

**Table 2**. Isolated compounds from *Pavonia* genus (cont.)

| Nº | Name | Source | Reference |
|---|---|---|---|
| **67** | β-sitosterol | AP of *P.c.*, *P.mal.* and *P.d.*; RT of *P.o.* | 31,106, 107,111, 112 |
| **68** | Stigmasterol | AP of *P.c.* | 111,112 |
| **69** | Ethyl iso-allocholate | RT of *P.o.* | 106 |
| | **Flavonoids** | | |
| **70** | Kaempferol 3-*O*-(6"-*O*-*p*-coumaroyl glucoside (Tiliroside) | AP of *P.c.*, *P.x.*, *P.mal.*, *P.v.*, *P.g.*, *P.d.* | 11,31,83, 107, 111-114 |
| **71** | 3,7-di-*O*-methylkaempferol | AP of *P.c.* | 111,112 |
| **72** | Quercetin | FL of *P.h.* and *P.l.*; AP of *P.x.*, *P.mal.*, *P.g.* | 11,83, 107,115 |
| **73** | 2-(3,4-dihydroxyphenyl) chromane-3,5,7-triol (Cyanidin) | | |
| **74** | Rutin | AP of *P.a.* and *P.x.* | 83,116 |
| **75** | Quercitrin | AP of *P.x.* | 83 |
| **76** | Kaempferol | AP of *P.mal.*, *P.g.* | 11,107 |
| **77** | 5,8-dihydroxy-7,4'-dimethoxyflavone | AP of *P.mal.* | 108 |
| **78** | 5,7-dihydroxy-4'-methoxyflavone (Acacetin) | AP of *P.g.* | 11,110, 117 |
| **79** | 5,7-dihydroxy-3,8,4'-trimethoxyflavone | | |
| **80** | 5-hydroxy-3,7,8,4'-tetramethoxyflavone | | |
| **81** | 5,7,4'-trihydroxy-3,8-dimethoxyflavone | | |
| **82** | 5,7,4'-trihydroxy-3-methoxyflavone | | |
| **83** | Kaempferol-3-glucoside (Astragalin) | AP of *P.d.* | 31 |
| **84** | Dihydrokaempferol (Aromadendrin) | RT of *P.o.* | 48,102-104 |
| **85** | Aromadendrene | | |
| | **Compounds Phenolics** | | |
| **86** | Gossypol | SD of *P.sch.* | 118 |
| **87** | Gallic acid | AP of *P.x.* | 83 |
| **88** | Catechin | | |
| **89** | Chlorogenic acid | | |
| **90** | Caffeic acid | AP of *P.x.*; LV of *P.sepio.* | 83,119 |
| **91** | Vanillic acid | LV of *P.mul.* and *P.sepio.* | 109,119 |
| **92** | Ferulic acid | | |
| **93** | *p*-Hydroxybenzoic acid | | |
| **94** | *p*-coumaric acid | LV of *P.mul.* | 109 |
| **95** | Salicylic acid | LV of *P.sepio.* | 119 |
| **96** | Cinnamic acid | | |
| **97** | *p*-Hydroxyphenylacetic acid | | |
| **98** | Gentisic acid | | |
| **99** | 4-[(1*E*)-prop-1-en-1-yl] benzoic acid | | |
| **100** | 2-[(1*E*)-prop-1-en-1-yl] benzoic acid | LV of *P.sepio.* | 119 |
| **101** | 3-[(1*E*)-prop-1-en-1-yl] benzoic acid | | |
| **102** | Syringic acid | | |
| **103** | Protocatechuic acid | | |
| | **Other compounds** | | |
| **104** | $17^3$-ethoxy-phaeophorbide *a* | AP of *P.mal.* | 107,108 |
| **105** | Phaeophytin *b* | | |
| **106** | $13^2$-*S*-hydroxy-phaeophytin *a* | AP of *P.g.* and *P.mal.* | 110 |
| **107** | $13^2$-*S*-hydroxy-$17^3$-ethoxy-phaeophorbide *a* | | |
| **108** | Triacontanol | | |
| **109** | *cis*-*p*-coumaric acid ethyl ester | | |
| **110** | Pavophylline | ST of *P.z.* | 26,120 |
| **111** | Methyl-19-ketotetracosanoate | | |
| **112** | 12-Methyl-tetracosan-9-one | FL of *P.z.* | 121 |
| **113** | Phenyl-alcohol | RT of *P.o.* | 48,102-104,106 |
| **114** | Benzoic acid-2-hydroxy-ethyl-ester | | |
| **115** | 5aH-3a,12-methano-1H-cyclopropa [5',6'] cyclodeca[1',2',1,5] cyclopenta [1,2-d] [1,3] dioxal-13-one | | |
| **116** | 2,7-diphenyl-1,6 dioxopyridazino[4,5,2',3'] pyrrolo[4',5'-d]pyridazine | | |
| **117** | Bicyclo [4, 3, 0] nonan-7-one,1-(2-methoxyvinyl) | | |
| **118** | 1,5-*bis* (3-cyclopentyl-propoxy)-1, 13,3,5,5-hexa-methyltrisiloxane | | |
| **119** | Pavonene* | | |
| **120** | Isovaleraldehyde | | |
| **121** | Azulene | | |
| **122** | Hexahydrofarnesyl-acetone | RT and AP of *P.o.* | 48,102-105 |
| **123** | 6-methyl-5-hepten-2-one | | |
| **124** | Isopentyl alcohol | AP of *P.o.* | 105 |
| **125** | Pentanol | | |
| **126** | Hexanol | | |
| **127** | Benzyl alcohol | | |
| **128** | Phenylethyl alcohol | | |
| **129** | 2-methoxy-*p*-cresol | | |
| **130** | 2-methoxy-4-vinylphenol | | |
| **131** | 2,4-*bis*(1,1-dimethyethyl)-phenol | | |
| **132** | Acetophenone | | |
| **133** | 2-nonanone | | |
| **134** | Isophorone | | |
| **135** | 4-keto-isophorone | | |
| **136** | *p*-menth-4-en-3-one | | |

**Table 2**. Isolated compounds from *Pavonia* genus (cont.)

| Nº | Name | Source | Reference |
|---|---|---|---|
| **137** | Dihydro-5-pentyl-2-(3H)-furanone | AP of *P.o.* | 105 |
| **138** | Hexahydropseudoionone | | |
| **139** | α-ionone | | |
| **140** | Dihydro-β-ionone | | |
| **141** | Dihydropseudoionone | | |
| **142** | β-ionone | | |
| **143** | 4,8,12-trimethyltridecan-4-olide | | |
| **144** | Phthalic acid | | |
| **145** | 2-pentyl-furan | | |
| **146** | 3-butyl-pyridine | | |
| **147** | *p*-allyl-anisole | | |
| **148** | 3-phenylpyridine | | |
| **149** | Dihydroactinolide | | |
| **150** | Ageratochromene | | |
| **151** | Hexadecanolactone | | |
| **152** | Hexanal | | |
| **153** | Benzaldehyde | | |
| **154** | Phenylacetaldehyde | | |
| **155** | (2*E*)-nonen-1-al | | |
| **156** | 1,3,4-trimethyl-3-cyclohexene-1-carboxyaldehyde | AP of *P.o.* | 105 |
| **157** | 2-methyl-3-phenyl-propanal | | |
| **158** | 2-hydroxy-4-methoxy-benzaldehyde | | |
| **159** | Pentadecanal | | |
| **160** | *p*-ethoxy-ethyl-benzoate | | |
| **161** | Isobutyl-phthalate | | |
| **162** | Naphthalene | | |
| **163** | Dodecane | | |
| **164** | 2-methyl-naphthalene | | |
| **165** | Tetradecane | | |
| **166** | 2,3,6-trimethyl-naphthalene | | |
| **167** | 3-(2-methyl-propenyl)-1H-indene | | |
| **168** | γ-cadinene | | |
| **169** | Hexadecane | | |

***P.a.***: *P. alnifolia*; ***P.c.***: *P.cancellata*; ***P.d.***: *P.distinguenda*; ***P.g.***: *P.glazioviana*; ***P.h.***: *P.hastata*; ***P.l.***: *P.lasiopetala*; ***P.mal.***: *P.malacophylla.*; ***P.mul.***: *P.multiflora*; ***P.o.***: *P.odorata*; ***P.sch.***: *P.schiedeana*; ***P.sepio.***: *P.sepioides*; ***P.sepiu.***: *P.sepium*; ***P.v.***: *P.varians*; ***P.x.***: *P.xanthogloea*; ***P.z.***: *P.zeylanica*. **AP**: Aerial Parts; **FL**: Flowers; **LV**: Leaves; **SD**: Seeds; **ST**: Stems; **RT**: Roots. *chemical structures not reported in the literature.

Studies described in literature review that activities of those compounds depend on the level of unsaturation and the size of hydrocarbons chain, resulting antibacterial, antifungal and antimycobacterial activities.[123,124] A recent study has shown that *P. malacophylla* and *P. cancellata* have palmitic, oleic and linoleic acids as majoritarian fatty acids.[125]

Eighteen fatty acids have been isolated and identified in species *P. sepium*, *P. odorata* and *P. zeylanica* (Table 2). Palmitic (**3**) and caproic (**10**) fatty acids showed significant activities in preparatory *in silico* studies as having inhibitory properties for the activities of glycerol-kinase enzyme from the fungus *Epidermophyton floccosum*[104] and inhibitory properties for the alcohol-dehydrogenase enzyme from the protozoan *Entamoeba histolytica*.[53]

*Terpenoids and steroids*

Terpenoids can be find in several groups of organisms. In plants, they are present under distinct aspects such as volatile molecules or adhered to resins. Their oxygenated, hydrogenated and dehydrogenated derivates have hydrocarbons as a base-structure, being widely distributed among plant species.[126]

Forty-six terpenoids have been isolated and identified in *P. odorata*, *P. multiflora*, *P. malacophylla*, *P. glazioviana* and *P. distinguenda*, being the last one of the most common of *Pavonia* species. Terpenoids α-amirine (**19**) and β-amirine (**20**) showed *in vitro* antibacterial activities against *Escherichia coli*.[107] The terpenoid cicloart-23Z-en-3β-25-diol (**28**) also presented *in vitro* antimicrobial activities against *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Candida tropicalis*, *Candida parapsilopsis* e *Aspergillus fumigatus*.[110]

Compounds loliolide (**26**) and the taraxerol *p*-metoxybenzoate (**27**) have demonstrated significant *in vitro* activities on the inhibition of electrons flux in photosystem II of plants, therefore allowing those molecules to become future candidates to herbicides as they prevent photosynthesis.[127]

Steroids are a minority class in *Pavonia* genus, with only five isolated compounds (**65-69**). Phytosteroids share as common structure ciclopentanoperidrofenaterne as carbonic skeleton, being β-sitosterol and stigmasterol the most common steroids of this genus and commonly encountered attached to sugar monomers.[128]

*Flavonoids and phenolic compounds*

Flavonoids are the most important and diversified class of phenolic compounds among natural products, being relatively abundant secondary metabolites and responsible for several functions in plants' organisms.[129]

Seventeen flavonoids have been isolated from *Pavonia* species, being sixteen of those members of subclass flavone (**70-84**) and one, to flavanonol subclass (**85**). Many isolated flavonoids have glycosids attached to their structures.

Among the isolated compounds, flavonoid 5,7-dihydroxy-3,8,4'-trimethoxyflavone (**79**) has demonstrated *in vitro* antimicrobial, *in silico* anticancer, *in vitro* antineoplasic, *in vitro* antiprotozoal and *in vito* photoprotective activities.[130,131]

The compound tiliroside (**70**) has demonstrated *in vitro* and *in vivo* antihypertensive activities, leading to reduction of peripheric vascular and vasorelaxant resistances by blocking the Calcium channels dependent of voltage ($Ca_V$) in cells of vascular smooth muscle (VSMCs);[132] *in vitro* antimicrobial activity;[31,107] *in silico* antidiabetic activity through interaction with human pancreatic α-amylase enzyme;[114] *in vitro* anticancer and anticolinesterasic activities.[31]

Nineteen phenolic compounds (**87-105**) have been identified and isolated from the species *P. xanthogloea*, *P. sepioides*, *P. multiflora* and *P. schiedeana*. Studies demonstrated that those compounds presented different activities. Gross ethanolic extract and fractions of ethyl acetated from extractive process of *P. sepioides* leaves have shown a large quantity of phenolic compounds present on the samples, which

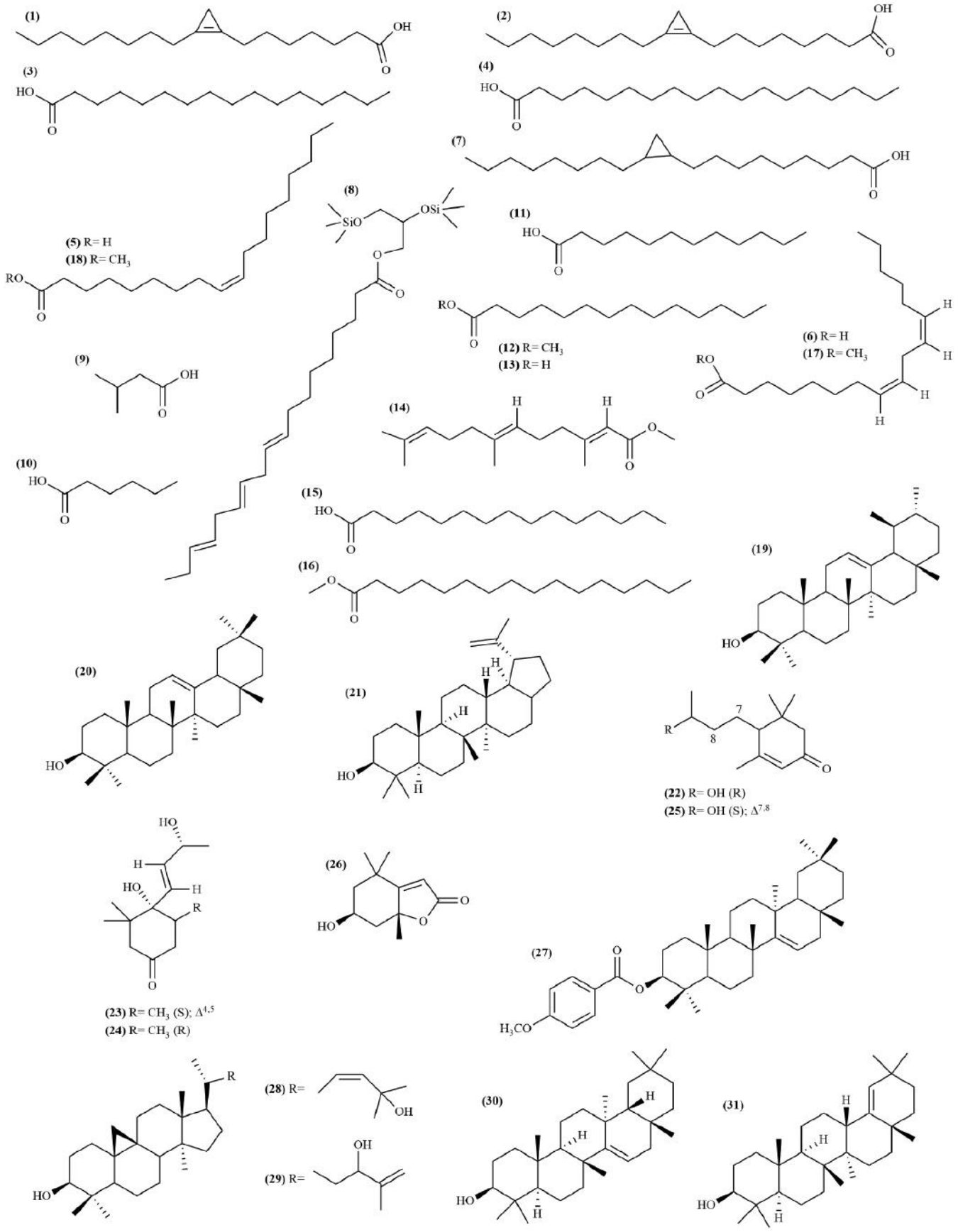



***Figure 2.*** *Compounds isolated from Pavonia species*

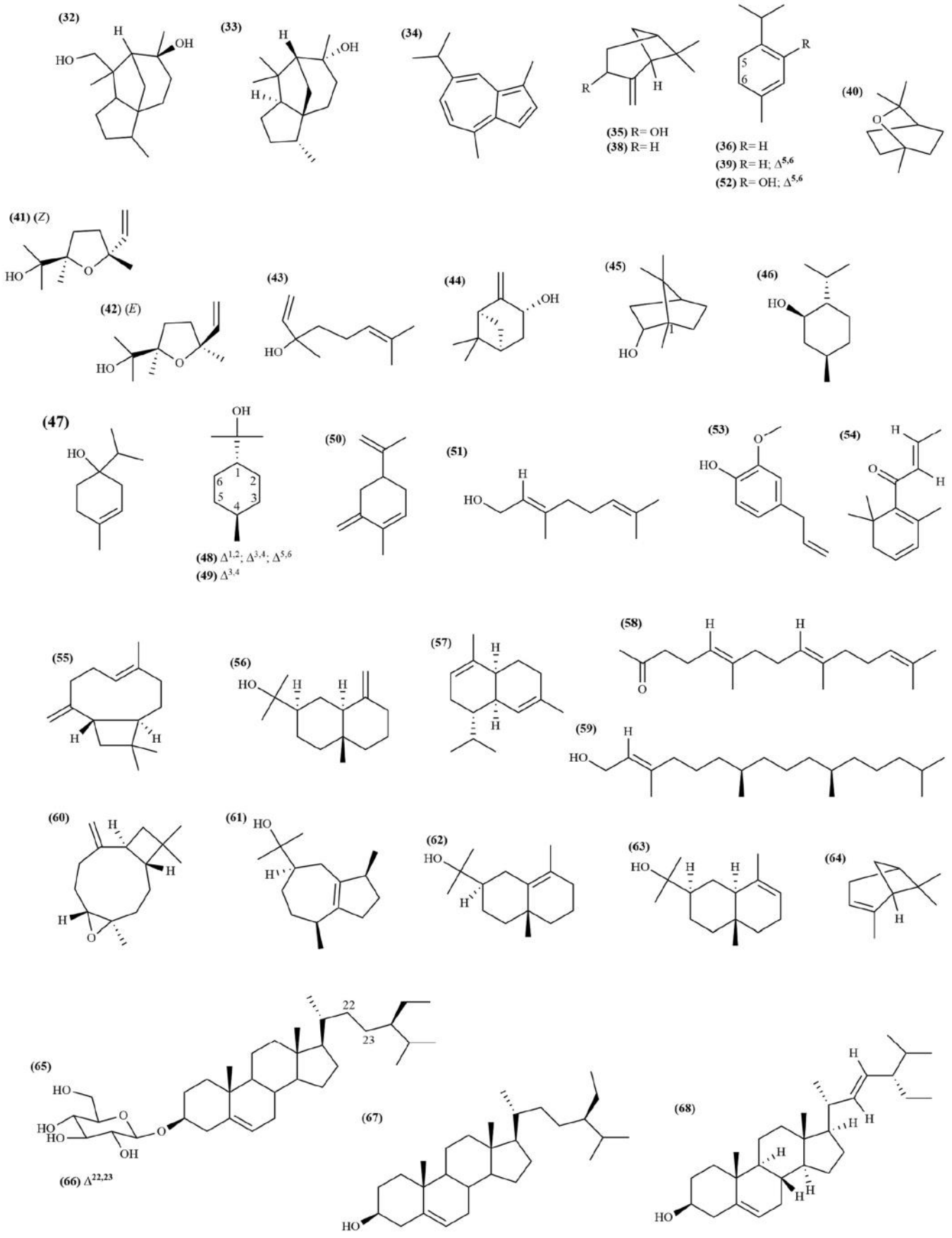



***Figure 2.*** *Compounds isolated from Pavonia species (cont.)*

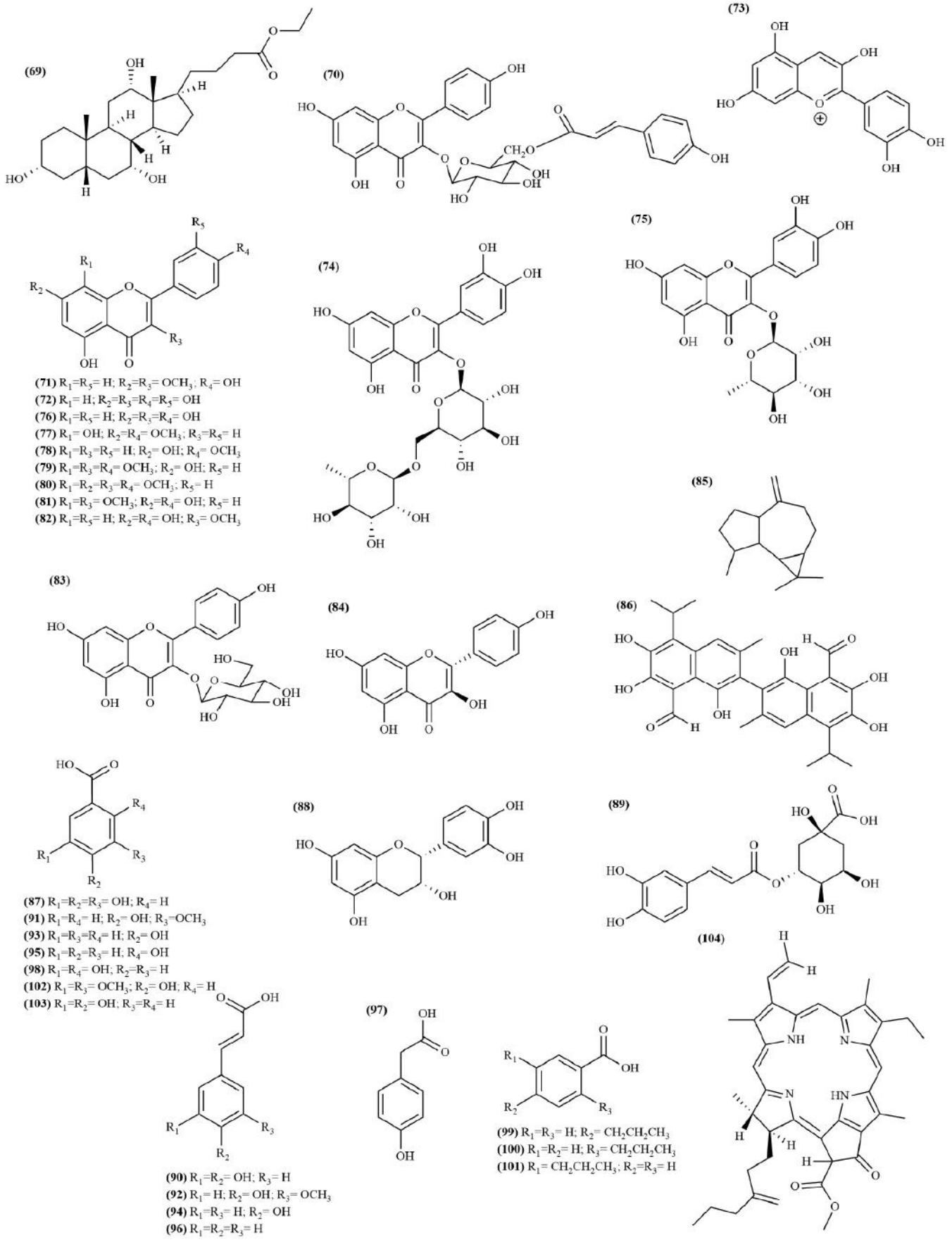



***Figure 2.*** *Compounds isolated from Pavonia species (cont.)*

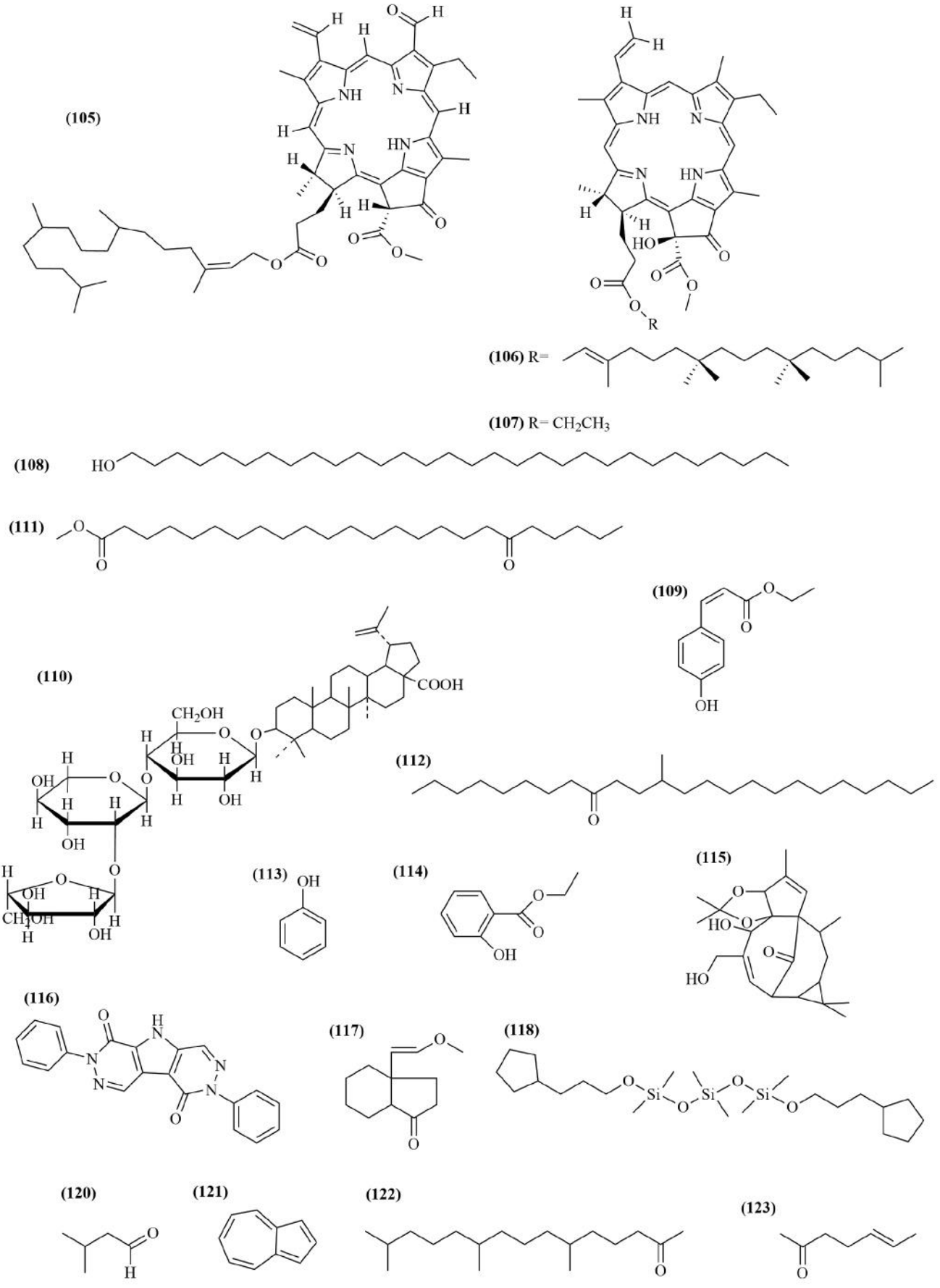



***Figure 2.*** *Compounds isolated from Pavonia species (cont.)*

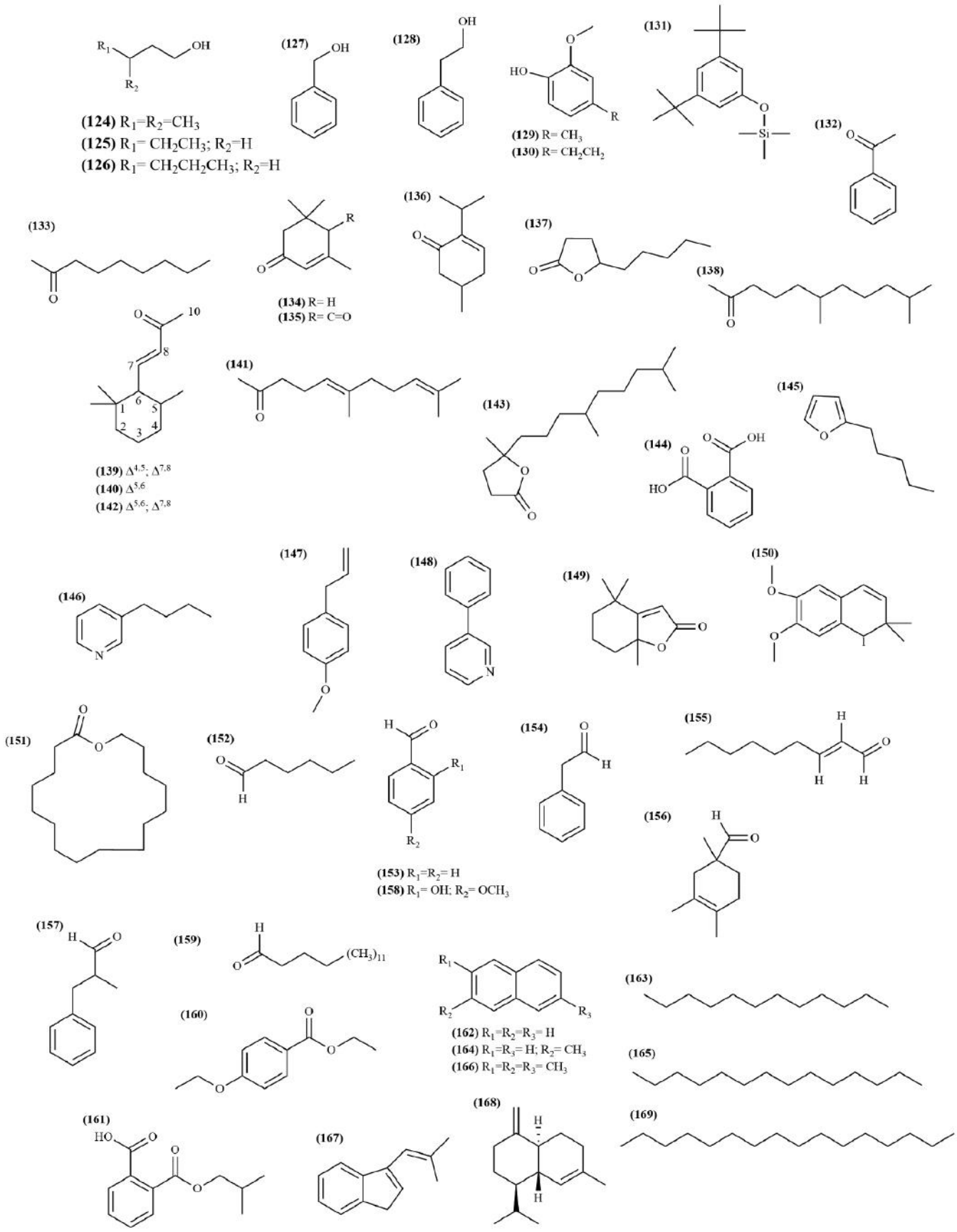



***Figure 2.*** *Compounds isolated from Pavonia species (cont.)*

explains the antioxidant activity of those substances against free radicals inhibitions tests through the methods of DPPH and ABTS.[119]

Besides that species, other studies have shown a large potential of antioxidant activity as a primordial activity of those phenolic compounds such as described for *P. xanthogloea*, *P. zeylanica*, *P. odorata*, *P. distinguenda*, *P. varians*, *P. glazioviana* and *P. procumbens*.[31,44,82,83,90,105,117,133-135]

*Other compounds*

Differently from previously mentioned compounds, other classes of secondary metabolites have been isolated and identified in a lesser frequency on *Pavonia* species. Among those compounds, we can list alcohols, aldehydes, ketones, pheophytins and hydrocarbons (**106**-**171**) (Table 2, Figure 2).

Chaves[107] has conducted a phytochemical study of *P. malacophylla*, isolating and identifying the compound $17^3$-ethoxy-phaeophorbide A (**104**), which has presented *in vitro* antibacterial activity against *Staphylococcus aureus* and *Escherichia coli*.

**Pharmacological study**

Several pharmacological activities involving *Pavonia* species have been arousing interest of scientific community hence there is a large collection of reports of their use in folk medicine. Researches have been developed to confirm the anti-inflammatory, analgesic, antioxidant, cytotoxic, antitumoral, antidiabetic, antimicrobial and antiviral potential of *Pavonia* species through scientific analysis (Table 3).

*Anti-inflammatory and analgesic activities*

Plants constitute a vast and precious source of natural products, which are essential to human health as they play several biological roles such as anti-inflammatory and analgesic activities, as it has been demonstrated by some studies over extracts and isolated compounds.[106]

Alcoholic extract of *P. zeylanica* leaves has shown *in vivo* anti-inflammatory activity in rat foot edema induced by carrageenan and

**Table 3**. *In vitro*, *in vivo*, and *in silico* biological studies reported from *Pavonia* genus

| Species | Material used | Experimental model | Reference |
|---|---|---|---|
| | | **Anti-inflammatory and Analgesic Activity** | |
| ***P.z.*** | Leaves alcoholic extract | *In vitro* - anti-inflammatory and antinociceptive by inhibition the arachidonic acid pathway | 88 |
| ***P.z.*** | Leaves and stems aqueous extract | *In vitro* - anti-inflammatory and analgesic | 136 |
| ***P.z.*** | Leaves ethanolic extract | *In vitro* – anti-inflammatory activity by inhibition protein denaturation | 90 |
| ***P.o.*** | Roots extract | Anti-inflammatory activity | 137 |
| ***P.o.*** | Roots methanolic, chloroform and ethyl acetate extract | *In vitro* - anti-inflammatory | 106 |
| | | **Antioxidant Activity** | |
| ***P.x.*** | Aerial parts hexane fractions, dichloromethane, ethyl acetate, n-butanol, and water ethanolic extract | *In vitro* – inhibition of DPPH, $H_2O_2$ and sodium nitroprusside radicals (SNP) | 83 |
| ***P.v.*** | Aerial parts hydroalcoholic extract | *In vitro* - stabilization of radicals free DPPH | 82 |
| ***P.gla.*** | Aerial parts ethanolic extract | *In vitro* – inhibition of DPPH radicals | 117,134 |
| ***P.pro.*** | Leaves methanolic extract | *In vitro* – inhibition of ABTS radicals | 135 |
| ***P.d.*** | Aerial parts methanolic extract and hexane fraction | *In vitro* - inhibition of DPPH radicals | 31 |
| ***P.sep.*** | Leaves ethanolic extract, hexane fraction, dichloromethane fraction, ethyl acetate fraction and aqueous fraction | *In vitro* – inhibition of DPPH and ABTS radicals | 119 |
| ***P.z.*** | Leaves ethanolic extract | *In vitro* – inhibition of radicals free | 90 |
| ***P.o.*** | Whole plant methanolic extract, hydroalcoholic fractions and ethyl acetate | *In vivo* – inhibition of lipoperoxidation | 44 |
| ***P.o.*** | Aerial parts essencial oils | *In vitro* – inhibition of ORAC radicals | 105 |
| ***P.o.*** | Leaves aqueous extract | *In vitro* – inhibition of FRAP, NO radicals and reduction of phosphomolybdenum | 133 |
| | | **Antitumor and Cytotoxic Activity** | |
| ***P.gla.*** | 5,7-dihydroxy-3,8,4'-trimethoxy flavone | *In silico* - uterine and ovarian anticancer; *In vitro* - antineoplastic activity against sarcoma, carcinoma, melanoma and squamous cells | 130,131 |
| ***P.d.*** | Methanolic extract<br>Hexane fraction<br>Dichloromethane fraction<br>Tiliroside | *In vitro* – anticancer activity against leukemia, ovary, colon, prostate, kidney, breast, resistant breast, lung and melanoma; cytotoxic for *Artemia salina* larvae | 31 |
| ***P.o.*** | Whole plant methanolic extract, hydroalcoholic and ethyl acetate fractions | *In vitro* – Erlich's ascites carcinoma (EAC) and cytotoxic | 44 |
| ***P.o.*** | Whole plant methanolic extract | *In vitro* – lung and human breast cancers | 138 |
| | | **Antidiabetic Activity** | |
| ***P.v.*** | Tiliroside | *In silico* – interaction by the human pancreatic α-amylase enzyme | 114 |

**Table 3**. *In vitro*, *in vivo*, and *in silico* biological studies reported from *Pavonia* genus (cont.)

| Species | Material used | Experimental model | Reference |
|---|---|---|---|
| ***P.z.*** | Leaves aqueous extract<br>Leaves and stems aqueous extract | *In vitro* – reduced blood sugar levels | 86,136 |
| ***P.o.*** | Roots extract | *In vitro* – reduced blood sugar levels | 139 |
| | | **Antimicrobial and Antiviral Activity** | |
| ***P.mal.*** | Mixture of α-amirine and β-amirine<br>17³-ethoxy-pheoforbide A<br>Tiliroside<br>Acetate Fraction<br>Hexane:Acetate (9:1) fraction<br>Hexane:Acetate (1:1) fraction<br>Acetate:Methanol (9:1) fraction<br>Acetate:Methanol (1:1) fraction<br>Aerial parts Crude Ethanolic Extract | *In vitro* – *Staphylococcus aureus, Escherichia coli* and *Candida albicans* | 107 |
| ***P.gla.*** | 5,7-dihydroxy-3,8,4'-trimethoxy flavone<br>Cicloart-23Z-en-3β, 25-diol | *In vitro* – *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Candida tropicalis*, *Candida parapsilopsis*, *Aspergillus flavus* and *Aspergillus fumigatus* | 131 |
| ***P.pro.*** | Leaves methanolic extract | *In vitro* – *Staphylococcus aureus, Staphylococcus epidermidis, Escherichia coli, Klebsiella pneumoniae* and *Proteus mirabilis* | 63 |
| ***P.u.*** | Roots methanolic extract | *In vitro* – *Candida albicans*, *Aspergillus fumigatus*, *Fusarium culmorum*, *Staphylococcus aureus*, *Pseudomonas syringae* and *Erwinia amylovora.* | 76,77 |
| ***P.spi.*** | Whole plant ethanolic extract | *In vitro* – *Staphylococcus aureus* and *Klebsiella pneumoniae* | 140 |
| ***P.d.*** | Aerial parts methanolic extract, hexane, dichloromethane, ethyl acetate and n-butanolic fractions<br>Tiliroside | *In vitro* – *Staphylococcus aureus, Staphylococcus epidermidis, Bacillus subtillis, Klebsiela pneumoniae, Pseudomonas aeruginosa, Escherichia coli* and *Salmonella setubal* | 31 |
| ***P.z.*** | Leaves dichloromethane extract | *In vitro* – *Escherichia coli* and *Klebsiella aerogenes* | 85 |
| | Leaves ethyl acetate extract | *In vitro* – *Escherichia coli* | |
| | Leaves diethyl ether extract | *In vitro* – *Staphylococcus aureus* | |
| | Leaves methanolic extract | *In vitro* – *Bacillus subtilis*, *Escherichia coli* and *Klebsiella aerogenes* | |
| ***P.o.*** | Rhizomes essential oil | *In vitro* – *Staphylococcus aureus, Bacillus subtilis, Bacillus mycoides, Diplococcus pneumonia,Salmonella typhi H, Salmonella paratyphi A., Shigella flexneri, Vibrio cholerae Ogawa,Escherichia coli, Klebsiella sp.*; *Helminthosporium sp., Fusarium solani, Aspergillus flavus, Aspergillus niger, Aspergillus nidulans, Aspergillus fumigatus, Botrydiplodia sp., Alternaria sp., Rhizophus nodosus, Colletotrichum capsici, Trichophyton mentagrophytes, Chrysosporium indicum* and *Rhizoctonia sp.* | 35,141-143 |
| ***P.o.*** | Roots methanolic, chloroform and ethyl acetate extracts | *In vitro* – *Staphylococcus aureus* and *Candida albicans* | 106 |
| ***P.o.*** | Caproic and palmitic acids | *In silico* – inhibition of the activity of the glycerol kinase enzyme of *Epidermophyton floccosum* | 104 |
| | | **Other Activities** | |
| ***P.c.*** | Tiliroside | *In vitro* e *in vivo* – antihypertensive activity by reducing resistance peripheral vascular and vasorelaxing by blocking voltage-gated calcium channels (CaV) in vascular smooth muscle cells (VSMCs) | 132 |
| ***P.gle.*** | Leaves aqueous extract | *In vitro* – phytopesticidal activity against termites | 144 |
| ***P.l.*** | Leaves aqueous extract | *In vitro* - antiurolytic activity (inhibition of calcium oxalate nucleation by disintegrating into smaller particles with increasing fraction concentrations) | 34 |
| ***P.pra.*** | Leaves ethanolic extract | *In vitro* – inhibition of tyrosinase enzyme | 145 |
| ***P.sch.*** | Aerial parts methanolic extract | *In vitro* - Antiretroviral activity (reverse transcriptase inhibition) | 146,147 |
| ***P.sch.*** | Aqueous extract | Promoter of peripheral vascular blood flow; improves dryness and roughness of the skin and stimulates hair growth | 148 |
| ***P.sen.*** | Leaves aqueous ethanolic extracts | It does not present acute toxicity, however after 28 days the extract becomes nephrotoxic and slightly hepatotoxic | 68 |
| ***P.a.*** | Stems hydroethanolic extract | *In vivo* e *in vitro* - dose-dependent hypotensive and ACE inhibitor | 116 |
| ***P.a.*** | Stems ethanolic extract | *In vivo* - gastroprotective activity | 149 |
| ***P.mul.*** | Leaves ethanolic extract | *In vitro* - inhibitor of cathepsins K and V | 109 |

**Table 3**. *In vitro*, *in vivo*, and *in silico* biological studies reported from *Pavonia* genus (cont.)

| Species | Material used | Experimental model | Reference |
|---|---|---|---|
| ***P.mul.*** | Loliolide | *In vitro* - inhibition of electron flow in photosystem II | 127 |
| | Taraxerol *p*-methoxybenzoate | | |
| ***P.gla.*** | 5,7-dihydroxy-3,8,4'-trimethoxy flavone | *In vitro* – antiprotozoan (*Trichomonas vaginalis*)<br>*In vitro* - photoprotective activity with a high level of protection (25.01 FPS) | 130,131 |
| ***P.d.*** | Tiliroside | *In vitro* - inhibition of acetylcholinesterase (AChE) activity | 31 |
| ***P.z.*** | Leaves methanolic extract | *In vitro* - larvicide against *Culex quinquefasciatus* | 150 |
| ***P.z.*** | Leaves methanolic, hexanic, chloroformic, ethyl acetate and acetonic | *In vitro* - larvicide against *Anopheles stephensi* and *Culex quinquefasciatus* | 151 |
| ***P.z.*** | Leaves and stems ethanolic extract | *In vitro* – laxative activity | 136 |
| ***P.z.*** | Leaves ethanolic extract | *In vitro* - inhibition of denaturation of albumin, stabilization of the erythrocyte membrane and protection against hemolysis | 90 |
| ***P.o.*** | Rhizomes essential oil | *In vitro* – anthelmintic against tapeworms and roundworms | 35,141-143 |
| ***P.o.*** | Rhizomes essential oil | *In vitro* - Hypotensive, antispasmogenic and intestinal relaxant | 36 |
| ***P.o.*** | Whole plant extract | Antirheumatic, antiasthmatic/antibronchial activities | 137 |
| ***P.o.*** | Roots aqueous and alcoholic extracts | *In vitro* – anthelmintic against *Pheretima postuma* | 152 |
| ***P.o.*** | Leaves methanolic extract | *In vitro* – larvicidal and repellent activity against *Aedes aegypti*, *Anopheles stephensi* and *Culex quinquefasciatus* | 153 |
| ***P.o.*** | Caproic, palmitic acids and hexahydro-pharnesyl-acetone | *In silico* – inhibition of the activity of the enzyme alcohol dehydrogenase of *Entamoeba histolytica* | 53 |
| ***P.o.*** | Whole plant aqueous extract | *In vitro* – inhibits the formation of minerals in urine samples | 154 |
| ***P.o.*** | Whole plant aqueous extract | *In vitro* – controls human urinary calculogenesis | 155 |
| ***P.o.*** | Whole plant extract | Antiparasitic activity against *Entamoeba histolytica* | 29 |

***P.a.***: *P. alnifolia*; ***P.c.***: *P.cancellata*; ***P.d.***: *P.distinguenda*; ***P.gla.***: *P.glazioviana*; ***P.gle.***: *P.glechomifolia* ***P.l.***: *P.lasiopetala*; ***P.mal.***: *P.malacophylla*; ***P.mul.***: *P. multiflora*; ***P.o.***: *P.odorata*; ***P.pra.***: *P.praemorsa*; ***P.pro.***: *P.procumbens*; ***P.sch.***: *P.schiedeana*; ***P.sen.***: *P.senegalensis*; ***P.sep.***: *P.sepioides*; ***P.spi.***: *P.spinifex*; ***P.u.***: *P.urens*; ***P.v.***: *P.varians*; ***P.x.***: *P.xanthogloea*; ***P.z.***: *P.zeylanica.*

*in vivo* antinociceptive activity by inhibition of arachidonic acid formation.[88] Methanolic, chloroformic and ethyl acetate extracts of *P. odorata* roots have also demonstrated *in vivo* anti-inflammatory activity in albino rat foot edema induced by carrageenan.[106] (Table 3).

*Antioxidant activity*

Antioxidants are substances that control the action of free radicals, minimizing the risk of diseases, specially those related to oxidative damage on nervous system. Naturally, some enzymes are responsible for the protection of harmful effects of free radicals, such as catalasis and dismutasis superoxide, as well as natural products with antioxidant action such as ascorbic acid, tocopherol, phenolics and flavonoids.[133]

The evaluation of antioxidant activity of extracts from the aerial parts of *Pavonia* species has shown the presence of phenolics and flavonoids as its constituents, having those compounds demonstrated a huge antioxidant potential in tests through the methods DPPH (1,1-diphenil-2-picril-hidrazil), $H_2O_2$ (hydrogen peroxide), NO (nitric oxide), ABTS (2,2'-azino-*bis*(3-etilbenzotiazoline-6-sulphonic) acid), FRAP (Ferric Reduction Antioxidant Power), SNP (Sodium Nitroprussiate radicals), phosphomolybdenium reduction, ORAC (Oxygen Radical Absorbance Capacity) and TBARS (Thiobarbituric Acid Reactive Substances) (Table 3).

*Cytotoxic and anticancer activities*

Cancer is one of the most lethal diseases that affects humankind. Some phytochemical studies have demonstrated anticancer potentials in several plants due to their chemoprotective and antioxidant properties, which make plants an option to minimize the adverse effects of conventional cancer treatments.[156]

Extracts and isolated compounds from *P. glazioviana*, *P. distinguenda* and *P. odorata* have demonstrated anticancer activities. The tiliroside flavonoid isolated from *P. distinguenda* has shown *in vitro* anticancer activity against leukemic, ovarian, colon, prostate, kidney, breast, resistant breast and melanoma cells, besides being cytotoxic to *Artemia salina* larvae.[31]

Other flavonoid isolated from *P. glazioviana* (5,7-dihydroxy-3,8,4'-trimethoxyflavone) (**79**) has shown *in silico* anticancer activity against carcinogen uterine and ovarian cells, while having *in vitro* antineoplastic activity against sarcoma, carcinoma, melanoma and squamous cell carcinoma.[130,131]

Extracts from the whole plant of *P. odorata* has shown *in vitro* anticancer activity against Ehrlich Ascites Carcinoma (EAC), lung and breast cancer.[44,138]

*Antidiabetics activity*

Several plants are used by folk medicine worldwide against diabetes.[86] Some of the species quoted in literature are *P. zeylanica* and *P. odorata*. Extracts from their leaves, stems and roots have been evaluated regarding their *in vitro* antidiabetic activity, being constated a significant reduction of glycose levels in bloodstream.[86,136,139]

*In silico* hypoglycemic activity of the tiliroside flavonoid isolated from *P. varians* through the interaction of this compound with human pancreatic α-amylase enzyme presented a lesser linking energy of -9.4 kcal/mol, being more stable in its active site when compared to the standard drug acarbose, that presented an energy of -7.6 kcal/mol.[114]

*Antimicrobial activity*

Bacterial resistance has been increasing significatively in the last years, which leads to high mortalities caused by generalized infections. This fact is a consequence of ungovernable use of

antibiotics. For those reasons, the search for new natural compounds with antimicrobial activity and new action mechanisms if necessary for the control of such micro-organisms.[140]

Extracts, fractions and compounds isolated from *Pavonia* species have shown a great antimicrobial potential that has already been described in literature. Among the compounds that were tested against several fungal and bacterial lineages, we have α-amirine (**19**), β-amirine (**20**), 17[3]-ethoxy-phaeophorbide A (**104**)[107] isolated from *P. malacophylla*, cycloart-23Z-en-3β,25-diol (**28**), 5,7-dihydroxy-3,8,4'-trimethoxyflavone (**79**)[110] isolated from *P. glazioviana*, tiliroside (**70**)[31,107] isolated from *P. malacophylla* e *P. distinguenda* and caproic (**10**) and palmitic (**3**)[104] acids identified in *P. odorata* (Table 3).

*Other activities*

Other activities have been related for *Pavonia* species. Methanolic extract from *P. odorata* leaves has shown *in vitro* larvicide and repellent activities against *Aedes aegypti*, *Anopheles stephensi* and *Culex quinquefasciatus*.[153] Researches have shown anti-hypertensive,[36,116,132] anti-helminthic,[35,141-143,152] anti-urolithic,[34] gastroprotective,[149] laxative,[136] photoprotective,[131] antiretroviral[146,147] and several other kinds of activities.

Furthermore, a study on *P. senegalensis* has showed that fresh liquid ethanolic extract of leaves has not a very strong toxicity, becoming nephrotoxic and slightly hepatotoxic after 28 days.[68]

## CONCLUSIONS

*Pavonia* Cav. is one of the largest genus on Malvaceae *sensu lato* family and has showed different biologic activities amongst its species, which have already been mentioned in literature and scientific proved. Studies have shown that fatty acids, terpenoids, flavonoids and phenolics are the most common classes of secondary metabolites on this genus. Pharmacological *in vivo*, *in vitro* and *in silico* tests have given the researches promissory results due to the presence of those compounds, both isolated and present on the extracts, corroborating the reports of use of those herbs in folk medicine.

Nonetheless, there is a major need of keep exploring chemical and biological potentials of *Pavonia* species, both already and never studied, since medicinal plants are almost inexhaustible sources of bioactive molecules that can help the treatment and cure of several diseases that affect human populations worldwide.

This paper is a database with very relevant information from both phytochemical and biological studies of *Pavonia* species that can be further explored, aiming to understand the use of *Pavonia* by traditional medicine in various diseases, becoming alternatives for therapies by the use of these natural products with emphasis on the benefit of the world population.

## ACKNOWLEDGMENTS

We thank Coordenação de Aperfeiçoamento do Ensino Superior (CAPES) and Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) for all the support to our researches.

## REFERENCES

1. Mohammed, F.; Shifa, S. P.; *J. Pharmacogn. Phytochem.* **2019**, *8*, 1887.
2. Vijayashalini, P.; Jayanthi, G.; Abirami, P.; *Journal of Medicinal Plants Studies* **2017**, *5*, 331.
3. Reddy, A. M.; Suresh Babu, M. V.; Rao, R. R.; *Herba Pol.*, **2019**; *65*, 40 [Crossref].
4. Sterlin Raj, T.; Edal Kuvin, J.; Asha, K. R. T.; Mohammed, A. A.; Puspharaj, A.; Raubbin, R. S.; *World J. Pharm. Sci.* **2016**, *4*, 518.
5. Vadivel, V.; Sriram, S.; Brindha, P.; *Int. J. Green Pharm.* **2016**, *10*, 33 [Crossref].
6. Fernandes, D. A.; Assis, E. B.; Souza, M. S. R.; Souza, P. I. V.; Souza, M. F. V.; *Quim. Nova* **2020**, *43*, 787 [Crossref].
7. Johnson, M.; Maharajan, M.; Janakiraman, N.; *Journal of Medicinal Herbs and Ethnomedicine* **2015**, *1*, 125 [Crossref].
8. Grings, M.; Boldrini, I. I.; *Revista Brasileira de Biociências* **2013**, *11*, 352.
9. http://floradobrasil.jbrj.gov.br/jabot/floradobrasil/FB9118, acessada em abril 2022.
10. Esteves, G. L.; Krapovickas, A.; Boletim de Botânica da Universidade de São Paulo, **2009**, *27*, 63 [Crossref].
11. Mazzotti, M. R. R. M.; *Dissertação de Mestrado*, Universidade do Estado da Bahia, Brasil, 2015.
12. Pando, A. M. S. C.; *Dissertação de Mestrado*, Instituto de Botânica da Secretaria do Meio Ambiente, Brasil, 2009.
13. Behera, K. K.; Mandal, P.; Mahapatra, D.; *Ethnobotanical Leaflets* **2006**, *10*, 305.
14. Madhu, V.; Naik, D. S. R.; *Ethnobotanical Leaflets*, **2009**, *13*, 1337.
15. Mishra, R. K.; Patel, S. P.; Srivastava, A.; Vashistha, R. K.; Singh, A.; Puskar, A. K.; *Nature and Science* **2012**; *10*, 22.
16. Singh, P. S.; Kumar, P. P.; Srinivasulu, D.; *Nat. Oral Care Dent. Ther.* **2020**, 407 [Crossref].
17. Kingston, C.; Nisha, B. S.; Kiruba, S.; Jeeva, S.; *Ethnobotanical Leaflets* **2007**, *11*, 32.
18. Ranjithkumar, A.; Chittibabu, C. V.; Renu. G.; *Indian Journal of Medicine and Healthcare* **2014**, *3*, 322.
19. Adebisi, I. M.; Alebiosu, O. C.; *Int. J. Curr. Res. Chem. Pharm. Sci.* **2014**, *1*, 81.
20. Tadesse, M.; Hunde, D.; Getachew, Y.; *Ethiopian Journal of Health Sciences* **2005**, *15*, 89.
21. Megersa, M.; Jima, T. T.; Goro, K. K.; *J. Evidence-Based Complementary Altern. Med.* **2019**, 1 [Crossref].
22. Babu, N. V. J.; Murty, P. P.; Rao, G. M. N.; *International Journal of Botany and Research* **2020**, *10*, 55.
23. Babu, N. V. J.; Murty, P. P.; Rao, G. M. N.; *IOSR J. Pharm. Biol. Sci.* **2020**, *15*, 44 [Crossref]
24. Kumar, R. B.; Suryanarayana, B.; *Ethnobotanical Leaflets* **2008**, *12*, 896.
25. Somashekhara Achar, K. G.; Boosanur, V.; Shivanna, M. B.; *Indian Journal of Traditional Knowledge* **2015**, 1, 147.
26. Kannan, M.; Kumar, T. S.; Rao, M. V.; *Global Journal Research Medicinal Plants & Indigenous Medicine* **2016**, *5*, 203.
27. Tiwari, K. P.; Minocha, P. K.; *Phytochemistry* **1980**, *19*, 701 [Crossref].
28. Anand, R. M.; Nandakumar, N.; Karunakaran, L.; Ragunathan, M.; Murugan, V.; *Natural Product Radiance* **2005**, *5*, 139.
29. Daddam, J. R.; Kotha, P.; Katike, U.; Basha, S.; Dowlathabad, M. R.; *Research Square* **2020**, 1 [Crossref].
30. Khare, C. P.; *Indian Medicinal Plants – An Illustrated Dictionary*, New Delhi, 2007.
31. Agra, M. F.; Freitas, P. F.; Barbosa-Filho, J. M.; *Rev. Bras. Farmacogn.* **2007**, *17*, 114 [Crossref].
32. Garcia, C. M.; *Tese de Doutorado*, Universidade de Santa Maria, Brasil, 2007.
33. Caballero-George, C.; Gupta, M. P.; *Planta Med.* **2011**, *77*, 1189 [Crossref].
34. Ramprasad, R.; Anil, N.; Hameed, S. S.; Shifama, J. M. R.; Venkateshan, N.; *J. Drug Delivery Ther.* **2019**, *9*, 102 [Crossref].
35. Nakhare, S.; Garg, S. C.; *Ancient Science of Life* **1992**, *12*, 227.
36. Nakhare, S.; Garg, S. C.; Bhagwat, A. W.; *Ancient Science of* Life **1997**, *17*, 23.
37. Waghmare, S. D.; *International Research Journal on Advanced Science Hub* **2020**, *2*, 268 [Crossref].

38. Jamil, M.; Mansoor, M.; Latif, N.; Muhammad, S.; Gull, J.; Shoab, M.; Khan, A.; *Pak. J. Sci. Ind. Res., Ser. B* **2019**, *62*, 61 [Crossref].
39. Chitme, H. R.; Alok, S.; Jain, S. K.; Sabharwal, M.; *Int. J. Pharm. Sci. Res.*, **2010**, *1*, 24 [Crossref].
40. Panda, S. P.; Sahoo, H. K.; Subudhi, H. N.; Sahu, A. K.; *American Journal of Ethnomedicine* **2014**, *1*, 260.
41. Ahmed, S.; Hasan, M. M.; Ahmed, S. W.; Mahmood, Z. A.; Azhar, I.; Habtemariam, S.; *Phytopharmacology* **2013**, *4*, 390.
42. Ahmed, S.; Hasan, M. M.; Ahmed, S. W.; *Pak. J. Pharm. Sci.* **2014**, *27*, 1583.
43. Premamalini, P.; Sharmila, S.; *International Journal of Advanced Herbal Science and Technology* **2017**, *3*, 67 [Crossref].
44. Selvan, V. T.; Kakoti, B. B.; Gomathi, P.; Kumar, D. A.; Islam, A.; Gupta, M.; Mazumder, U. K.; *Pharmacologyonline* **2007**, *2*, 453.
45. Murty, P. P.; Rao, G. M. N.; Rao, D. S.; *Journal of Science* **2015**, *5*, 385.
46. Jenifer, S. P.; Lekha, K.; *Journal of Medicinal Plants Studies* **2019**, *7*, 196.
47. Shukla, V. S.; Nigam, I. C.; *Proc. Inst. Chem. (India)* **1961**, *33*, 229.
48. Baslas, K. K.; *Perfum. Essent. Oil Rec.* **1959**, *50*, 896.
49. Kirtikar, K. R.; Basu, B. D.; Pâninî office, Bahadurganj, 1918.
50. Gritto, M. J.; Nanadagopalan, V.; Doss, A.; *Adv. Appl. Sci. Res.* **2015**, *6*, 157.
51. Nandagopalan, V.; Doss, A.; Anand, S. P.; *The International Journal Of Science & Technoledge* **2014**, *2*, 1.
52. Bensy, D.; Gamble, A; Kaptchuk, T.; *Chinese Herbal Medicine – Materia medica*, **1993**, 331.
53. Nayak, J. K.; Sahu, S. K.; Barik, E.; Bhattacharyay, D.; Pandey, M.; *Plant Cell Biotechnol. Mol. Biol.* **2020**, *21*, 166 [Crossref].
54. Lakshmanan, R.; Thiruvalluvar, M.; Subramanian, M. P. S.; Ganthi, A. S.; *Eur. J. Biomed. Pharm. Sci.* **2018**, *5*, 294.
55. Randive, K. R.; Hatekar, S.; *Eastern Geographer* **2010**, *15*, 79.
56. Sharma, J. P.; Srivastava, A.; Thakur, S. P.; Barpete, P. K.; Singh, S.; *Int. J. Pharm. Life Sci.* **2010**, *1*, 18.
57. Iswarya, P.; Lakshmikantham, T.; Mohan, S.; International Journal *of* Ayurveda *and* Pharma Research **2019**, *7*, 45.
58. Jayaprasad, B.; Thamayandhi, D.; Sharavanan, P. S.; *International Journal of Research in Pharmaceutical and Biosciences* **2012**, *2*, 1.
59. Deepthy, R.; Remashree, A. B.; *International Journal of Herbal Medicine* **2014**, *2*, 92.
60. Soudahmini, E.; Ganesh, M. S.; Panayappan, L.; Madhu, C. D.; *Natural Product Radiance* **2005**, *4*, 492.
61. Shanmugam, S.; Annadurai, M.; Rajendran, K.; *J. Appl. Pharm. Sci.* **2011**, *1*, 94.
62. Karthiyayini, R.; *Int. J. Pharm. Sci. Res.* **2012**, *3*, 1829 [Crossref].
63. Manoranjitham, M.; Premalatha, S.; *Int. J. Adv. Res. Biol. Sci.*, **2015**, *2*, 256.
64. Kumar, P. P.; Ayannar, M.; Ignacimuthu, S.; *Indian Journal of Traditional Knowledge* **2007**, *6*, 579.
65. Ticktin, T.; Dalle, S. P.; *J. Ethnopharmacol.*, **2005**, *96*, 233. [10.1016/j.jep.2004.09.015]
66. Suryanarayana, S. N.; Seetharami, R. T. V. V.; *Medicinal Plant Research* **2017**, *7*, 1. [Crossref].
67. Andrade-Cetto, A.; Heinrich, M.; *J. Ethnopharmacol.* **2005**, *99*, 325. [Crossref].
68. Shehu, U. F.; Aliyu, I. M.; Ilyas, N.; Ibrahim, G.; *Trop. J. Nat. Prod. Res.* **2020**, *4*, 21. [Crossref].
69. Abdulhamid, Z.; *Interviewer*, Kaduna, 2016.
70. Neuwinger, H.; *Medpharm Scientific*, Stuttgart, 2000.
71. Burkill, H. M.; *Royal Botanic Gardens Kew*, United Kingdom, 1997.
72. Francis, J. K.; *Gen. Tech. Rep. IITF-GTR-26*, San Juan, 2004.
73. Liogier, H. A.; *Iberoamericana de Ediciones, Inc.*, San Juan, 1990.
74. Michael, M.; *Dissertação de Mestrado*, Universidade do Cairo, Egito, 2018.
75. Rasoanaivo, P.; Petitjean, A.; Ratsimamanga-Urverg, S.; Rakoto-Ratsimamanga, A.; *J. Ethnopharmacol.* **1992**, *37*, 117 [Crossref].
76. De Boer, H. J.; Kool, A.; Broberg, A.; Mziray, W. R.; Hedberg, I.; Levenfors, J. J.; *J. Ethnopharmacol.*, **2005**, *96*, 461 [Crossref].
77. Dayal, B.; Purohit, R. M.; *Flavour Industry* **1971**, *2*, 484.
78. Rabearivony, A. D.; Kuhlman, A. R.; Razafiarison, Z. L.; Raharimalala, F.; Rakotoarivony, F.; Randrianarivony, T.; Rakotoarivelo, N.; Randrianasolo, A.; Bussmann, R. W.; *Ethnobotany Research & Applications* **2015**, *14*, 123 [Crossref].
79. Pavela, R.; Benelli, G.; *Exp. Parasitol.* **2016**, *167*, 103. [Crossref].
80. Karunamoorthi, K.; Hailu, T.; *Journal of Ethnobiology and Ethnomedicine* **2014**, *10*, 1 [Crossref].
81. Degu, S.; Berihun, A.; Muluye, R.; Gemeda, H.; Debebe, E.; Amano, A.; Abebe, A.; Woldkidan, S.; Tadele, A.; *Pharmacy & Pharmacology International Journal* **2020**, *8*, 274 [Crossref].
82. Leal, R. S.; Maciel, M. A. M.; Dantas, T. N. C.; Melo, M. D.; Pissinate, K.; Echevarria, A.; *Rev. Fitos* **2007**, *3*, 26.
83. Mostardeiro, C. P.; Mostardeiro, M. A.; Morel, A. F.; Oliveira, R. M.; Machado, A. K.; Ledur, P.; Cadoná, F. C.; Silva, U. F.; Cruz, I. B. M.; *Pharmacognosy Magazine* **2014**, *10*, 630 [Crossref].
84. Grochowski, D. M.; Locatelli, M.; Granica, S.; Cacciagrano, F.; Tomczyk, M.; *Compr. Rev. Food Sci. Food Saf.* **2018**, *17*, 1395 [Crossref].
85. Samy, R. P.; Ignacimuthu, S.; *J. Ethnopharmacol.* **2000**, *69*, 63 [Crossref].
86. Kalarani, D. H.; Venkatesh, P.; Dinakar, A.; *Res. J. Pharm. Technol.* **2009**, *2*, 789.
87. Basu, S. K.; Rupeshkumar, M.; Kavitha, K.; *Pharmacologyonline* **2009**, *1*, 1144.
88. Kumari, A.; Lalitha, K. G.; Venkatachalam, T.; Kalaiselvi, P.; Sethuraman, M. G.; *Asian Journal of Research in Pharmaceutical Science* **2011**, *1*, 113.
89. Chavan, S.; Singh, A.; Daniel, M.; *International Journal of Pharmaceutical Development & Technology* **2014**, *4*, 157.
90. Kumar, M. P.; Sivasankar; Senthilvel, G.; Prabhu, L. R.; *World J. Pharm. Pharm. Sci.* **2018**, *7*, 644 [Crossref].
91. Sathishkumar; Anbarasu; *Int. J. Plant, Anim. Environ. Sci.* **2019**, *9*, 6.
92. Bhuvaneswari, R.; Ramanathan, R.; Mathumathi, T. K.; Madheswaran, A.; Dhandapani, R.; *Journal of Medicinal Plants Studies* **2015**, *3*, 33.
93. Muthuraja, R.; Nandagopalan, V.; Thomas, B.; Marimuthu, C.; *European Journal of Environmental Ecology* **2014**, *1*, 33.
94. Murty, P. P.; Rao, G. M. N.; *J. Phytol.* **2010**, *2*, 17.
95. Madhava, C. K.; Sivaji, K.; Tulasi, R.; *Students offset printers*, Tirupati, 2008.
96. Wilson, E.; Rajamanickam, G. V.; Vyas, N.; Agarwal, A.; Dubey, G. P.; *Indian Journal of Traditional Knowledge* **2007**, *6*, 678.
97. Rao, D. M.; Rao, U. V. U. B.; Sudharshanam, G.; *Ethnobotanical Leaflets* **2006**, *10*, 198.
98. Madrigal, R. V.; Smith Jr., C. R.; *Lipids* **1973**, *8*, 407.
99. Bohannon, M. B.; Kleiman, R.; *Lipids* **1977**, *13*, 270.
100. Harwood, J. L. In *The Biochemistry of Plants*; Stumpf, P. K., ed.; Davis, 1980, cap. 1.
101. Rao, K. S.; Lakshminarayana, G.; *J. Am. Oil Chem. Soc.* **1985**, *62*, 714.
102. Rayar, A.; Aeganathan, R.; Ilayaraja, S.; Prabakaran, K.; Manivannan, R.; *Am. J. Phytomed. Clin. Ther.* **2015**, *3*, 79.
103. Kumar, A.; Pande, C. S.; Kaul, R. K.; *Indian J. Appl. Chem.* **1965**, *28*, 190.
104. Dube, P.; Purohit, R. M.; *Riechst., Aromen, Koerperpflegem.* **1973**, *23*, 149.
105. Sahu, S. K.; Nayak, J. K.; Prakash, K. V. D.; Bhattacharyay, D.; *Plant Cell Biotechnol. Mol. Biol.* **2020**, *21*, 149.
106. Kashima, Y.; Nakaya, S.; Miyazawa, M.; *J. Oleo Sci.* **2014**, *63*, 149 [Crossref].

107. Chaves, O. S.; *Tese de Doutorado*, Universidade Federal da Paraíba, Brasil, 2016.
108. Albuquerque, J. B. L.; trabalho não publicado.
109. Lopes, L. G.; *Dissertação de Mestrado*, Universidade Federal do Espírito Santo, Brasil, 2014.
110. Oliveira, M. S.; *Tese de Doutorado*, Universidade Federal da Paraíba, Brasil, 2019.
111. Casimiro-Júnior, F.; Chaves, O. S.; Fernandes, M. M. M. S.; Agra, M. F.; Teles, Y. C. F.; Souza, M. F. V.; *36ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química*, São Paulo, Brasil, 2013.
112. Fernandes, M. M. M. S.; *Dissertação de Mestrado*, Universidade Federal da Paraíba, Brasil, 2013.
113. Gualberto, F. T. A.; *Trabalho de Conclusão de Curso*, Universidade Federal da Paraíba, Brasil, 2013.
114. Fernando, L. M.; Lima, A. A.; Dias, W. S.; Moura-Júnior, R. T.; Teles, Y. C. F.; Souza, M. F. V. In *Processos Químicos e Biotecnológicos*; Andrade, D. F., Souza, A. A., Andrade, D. E., Oliveira, E. J., Santos, F., Lopes, J. E. F., Neves, O. F.,Lima, L. C., Ferreira Filho, N., Oliveira, V. A., eds.; Editora Poisson: Belo Horizonte, 2020, cap. 3.
115. Puckhaber, L. S.; Stipanovic, R. D.; Bost, G. A.; *Herbs, Medicinals, and Aromatics* **2002**, 556.
116. Andrade, T. U.; Ewald, B. T.; Freitas, P. R.; Lenz, D.; Endringer, D. C.; *Int. J. Pharm. Pharm. Sci.* **2012**, *4*, 124.
117. Silva, C. M.; *Trabalho de Conclusão de Curso*, Universidade Federal da Paraíba, Brasil, 2018.
118. Sotelo, A.; Villavicencio, H.; Montalvo, I.; Gonzalez-Garza, M. T.; *Afr. J. Tradit., Complementary Altern. Med.* **2005**, *1*, 4 [Crossref].
119. Gasca, C. A.; Cabezas, F. A.; Torras, L.; Bastida, J.; Codina, C.; *Free Radicals and Antioxidants*, **2013**, *3*, 55 [Crossref].
120. Tiwari, K. P.; Minocha, P. K.; Masood, M., *Proc. Natl. Acad. Sci., India, Sect. A* **1978**, *48*, 158.
121. Tiwari, K. P.; Choudhary, R. N.; *Acta Cienc. Indica, Chem.* **1980**, *6*, 36.
122. Desbois, A. P.; Smith, V. J.; *Appl. Microbiol. Biotechnol.*, **2010**, *85*, 1629 [Crossref].
123. Mandey, J. S.; Wolayan, F. R.; Pontoh, C. J.; Kowel, Y. H. S.; *Scientific Papers, Series D, Animal Science* **2020**, *63*, 214.
124. Seidel, V.; Taylor, P. W.; *Int. J. Antimicrob. Agents* **2004**, *23*, 613 [Crossref].
125. Fernandes, D. A.; Chaves, O. S.; Teles, Y. C. F.; Agra, M. F.; Vieira, M. A. R.; Silva, P. S. S.; Marques, M. O. M.; Souza, M. F. V.; *Quim. Nova* **2021**, *44*, 137 [Crossref].
126. Yadav, N.; Yadav, R.; Goyal, A.; *Int. J. Pharm. Sci. Rev. Res.* **2014**, *27*, 272.
127. Lopes, L. G.; Tavares, G. L.; Thomaz, L. D.; Sabino, J. R.; Borges, K. B.; Vieira, P. C.; Veiga, T. A. M.; Borges, W. S.; *Chem. Biodiversity* **2016**, *13*, 284 [Crossref].
128. Santos, R. A. F.; *Dissertação de Mestrado*, Universidade Federal da Bahia, Brasil, 2010.
129. Santos, D. S.; Rodrigues, M. M. F.; *Estação Científica (UNIFAP)* **2017**, *7*, 29 [Crossref].
130. Sousa, A. P.; Oliveira, M. S.; Fernandes, D. A.; Ferreira, M. D. L.; Cordeiro, L. V.; Souza, H. D. S.; Souza, M. F. V.; Pessoa, H. L. F.; Oliveira-Filho, A. A.; Silveira e Sá, R. C.; *Scientific Electronic Archives* **2021**, *13*, 120 [Crossref].
131. Sousa, A. P.; Nunes, M. K. S.; Oliveira, M. S.; Fernandes, D. A.; Ferreira, M. D. L.; Cordeiro, L. V.; Souza, H. D. S.; Souza, M. F. V.; Pessoa, H. L. F.; Oliveira Filho, A. A.; Silveira e Sá, R. C.; *Sci. Plena* **2020**, *16*, 1 [Crossref].
132. Silva, G. C.; Pereira, A. C.; Rezende, B. A.; Silva, J. F. P.; Cruz, J. S.; Souza, M. F. V.; Gomes, R. A.; Teles, Y. C. F.; Cortes, S. F.; Lemos, V. S.; *Planta Med.* **2013**, *79*, 1003. [Crossref].
133. Rajalakshmi, P.; Vadivel, V.; Subashini, G.; Pugalenthi, M.; *Int. J. Adv. Res.* **2016**, *4*, 1751 [Crossref].
134. Silva, C. M.; Félix, M. D.; Aquino, A. K.; Oliveira, M. S.; Teles, Y. C. F.; Souza, M. F. V.; *Mol2Net* **2016**, *2*, 1 [Crossref].
135. Badami, S.; Channabasavaraj, K. P.; *Pharm. Biol.* **2007**, *45*, 392 [Crossref].
136. Kalarani, D. H.; Dinakar, A.; Senthilkumar, N.; *Int. J. Drug Dev. Res.* **2012**, *4*, 298.
137. Kirtikar, K. R.; Basu, B. D.; *Indian Medicinal Plants*, International Book Distributors Book Sellers and Publishers: Deheradun, 1999.
138. Girish, H. V.; Vinod, A. B.; Dhananjaya, B. L. Satish Kumar, D.; Duraisamy, S.; *Pharmacogn. J.* **2016**, *8*, 28 [Crossref].
139. Rayar, A.; Manivannan, R.; *Int. J. Pharm. Sci. Invent.* **2015**, *4*, 46 [Crossref].
140. Lozano, C. M.; Vasquez-Tineo, M. A.; Ramirez, M.; Infante, M. I.; *Pharmacogn. Commun.* **2021**, *11*, 52 [Crossref].
141. Garg, S. C.; *Anthelmintic activity of some medicinal plant products*, Research Periodicals and Book Publishing House, Houston, 2003, 207.
142. Garg, S. C.; *Natural Product Radiance* **2005**, *4*, 18.
143. Bhavani, S.; *J. Pharm. Sci. Res.* **2015**, *7*, 812.
144. Singh, D.; Singh, B.; Dutta, B. K.; *International Journal of Science* **2012**, *4*, 3 [Crossref].
145. Mapunya, M. B.; *Dissertação de Mestrado*, Universidade de Pretória, África do Sul, 2009.
146. Matsuse, I. T.; Lim, Y. A.; Hattori, M.; Correa, M.; Gupta, M. P.; *J. Ethnopharmacol.* **1999**, *64*, 15 [Crossref].
147. Dan, G.; Castellar, A.; *Alumni – Revista Discente da UNIABEU* **2015**, *3*, 8.
148. Shaku, M.; Yamamoto, T.; Shishido, M.; Takashi, T.; Yoshitani, S.; Yoshimi, F., *Jpn. Kokai Tokkyo Koho* **2001**. (JP 2001181172).
149. Ewald, B. T.; Loyolla, C. M.; Pereira, A. C. H.; Lenz, D.; Medeiros, A. R. S; Andrade, T. U.; Nogueira, B. V.; Pereira, T. M. C.; Endringer, D. C.; *Rev. Bras. Plantas Med.* **2015**, *17*, 392 [Crossref].
150. Vahitha, R.; Venkatachalam, M. R.; Murugan, K.; Jebanesan, A.; *Bioresour. Technol.* **2002**, *82*, 2 [Crossref].
151. Kamaraj, C.; Abdul Rahuman, A.; Bagavan, A.; Abduz Zahir, A.; Elango, G.; Kandan, P.; Rajakumar, G.; Marimuthu, S.; Santhoshkumar, T.; *Tropical Biomedicine* **2010**, *27*, 211.
152. Singhai, A.; Singour, P. K.; Garg, G.; Pawar, R. S.; Patil, U. K.; *Research Journal of Pharmacology and Pharmacodynamics* **2009**, *1*, 82.
153. Selvakumar, B.; Gokulakrishnan, J.; Elanchezhiyan, K.; Deepa, J.; *International Journal of Current Advanced Research* **2015**, *4*, 221.
154. Mago, N.; Sofat, I. B.; Jethi, R. K.; *Indian J. Med. Res.* **1989**, *90*, 77.
155. Jethi, R. K.; Duggal, B.; Sahota, R. S.; Gupta, M.; Sofat, I. B.; *Indian J. Med. Res.* **1983**, *78*, 422.
156. Jeeva Gladys, R.; Kalai Arasi, R.; Elangovan, S.; Mubarak, H.; *J. Appl. Pharm. Sci.* **2013**, *3*, 176 [Crossref].


This is an open-access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License.


Anexo 2

*Quim. Nova,* Vol. 48, No. 6, e-20250134, 1-8, 2025 http://dx.doi.org/10.21577/0100-4042.20250134

Article

# PHYTOCHEMICAL STUDY FROM THE AERIAL PARTS OF *Pavonia malacophylla* (MALVACEAE) AND EVALUATION OF ITS ANTIMICROBIAL POTENTIAL

**Janderson Barbosa Leite de Albuquerque[a], Otemberg Souza Chaves[a], Wallace Amorim Machado de Queiroz[a], Bárbara Fernandes Araújo Rodrigues[b], Diégina Araújo Fernandes[c], Fábio Correia Sampaio[d], Maria de Fátima Agra[e] and Maria de Fátima Vanderlei de Souza[a,b,*]**

[a]Pós-Graduação em Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos, Centro de Ciências da Saúde, Universidade Federal da Paraíba, 58051-900 João Pessoa – PB, Brasil

[b]Departamento de Ciências Farmacêuticas, Universidade Federal da Paraíba, Centro de Ciências da Saúde, 58051-900 João Pessoa – PB, Brasil

[c]Instituto de Pesquisas em Produtos Naturais, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 21941-902 Rio de Janeiro – RJ, Brasil

[d]Laboratório de Biologia Oral, Centro de Ciências da Saúde, Universidade Federal da Paraíba, 58051-900 João Pessoa – PB, Brasil

[e]Departmento de Biotecnologia, Centro de Biotecnologia, Universidade Federal da Paraíba, 58051-900 João Pessoa – PB, Brasil

Received: 01/30/2025; accepted: 04/03/2025; published online: 05/05/2025

*Pavonia malacophylla* (Link & Otto) Garcke (Malvaceae *sensu lato*), commonly known as "malva-rosa" or "malva-veludo", is traditionally used to treat flu, cough, and heart pain. The crude ethanolic extract (CEE) of *P. malacophylla* was obtained through maceration with ethanol, concentrated using a rotary evaporator, and subjected to vacuum liquid chromatography with silica gel 60 as the stationary phase. Hexane, ethyl acetate, and methanol were used as mobile phases in increasing polarity gradients, yielding nine fractions. Chromatographic fractionation led to the isolation and identification of 18 compounds, including one alcohol, three steroids, three triterpenes, four pheophytins, six flavonoids and one phenolic acid. Among these, compounds **1** (decanol), **4a** (α-amyrin), **4b** (β-amyrin), **11** (5,8-dihydroxy-7,4'-dimethoxyflavone) and **16** (methyl-4-hydroxycinnamate), were identified for the first time in the genus *Pavonia*. Microbiological assays of the CEE, fractions, and isolated compounds were conducted against *Escherichia coli*, *Candida albicans*, and *Staphylococcus aureus*, demonstrating antimicrobial activity at concentrations ranging from 250 to 400 μg $mL^{-1}$.

Keywords: *Pavonia malacophylla*; Malvaceae *sensu lato*; antimicrobial activity.

## INTRODUCTION

The development and spread of microbial infections have generated worldwide concern.[1] The indiscriminate use and increase in consumption of antimicrobial agents, together with inadequate prescriptions, has contributed to the process of resistance to these drugs, whether through spontaneous mutations or the attribution of new genes that will be inherited by offspring.[2,3] Furthermore, the number of infections caused by multidrug-resistant microorganisms has amplified the spectrum of intractable diseases in the current context.[4]

From the moment penicillin was developed in the mid-1940s, the field of science turned to the search for antimicrobial derivatives from natural products.[5] Medicinal plants perform an essential role as the main therapeutic source used in folk medicine. Previous ethnic-medical-botanical studies form the basis for the discovery of new antimicrobials from these herbs.[6] Microbiological tests have demonstrated the high antimicrobial power of extracts, fractions, and isolated compounds, such as pheophytins, alkaloids, terpenoids and flavonoids, confirming the potential activity of these natural products.[7-11]

The Malvaceae *sensu lato* family comprises around 245 genera and 4465 species distributed throughout tropical and subtropical regions of the world.[12] Among the various genera belonging to this family, the genus *Pavonia* Cav. concentrates approximately 271 species distributed throughout the New and Old World, including Brazil.[13] Previous studies[11,14] report the prevalence of several classes of secondary metabolites in this genus, such as fatty acids, phenolics, steroids, terpenoids, flavonoids, pheophytins and hydrocarbons.

*Pavonia malacophylla* (Link & Otto) Garcke is popularly known as "malva-rosa" or "malva-veludo", distributed throughout Brazil. Its leaves and roots have been used to treat coughs and flu in the form of syrup, in addition to the use of its raw leaves to treat heart pain.[15,16] A preliminary phytochemical screening detected the presence of triterpenes, steroids, flavonoids, coumarins, tannins and alkaloids in the crude ethanolic extract from its aerial parts.[17]

Considering these aspects and the antimicrobial potential of species of the genus *Pavonia* linked to the shortage of phytochemical data on the species *P. malacophylla*, the present study aims to isolate and identify substances from their aerial parts and evaluate their antimicrobial activity.

## EXPERIMENTAL

### General and chemical procedures

Glass chromatographic columns were used for the isolation and purification of chemical constituents, packed with silica gel 60 (ASTM, 230-400 mesh, Macherey Nagel®), Sephadex LH-20 (Sigma-Aldrich®) or Amberlite XAD-2 (Sulpeco®).

Analytical thin layer chromatography (TLC) was carried out using plates impregnated with silica gel (Whatman®) to analyze the chromatographic profile of the compounds obtained in all processes and analyzed by ultraviolet radiation (UV) at wavelengths of 254 and 366 nm and revealed with diphenylboryloxyethylamine (NP) or

*e-mail: mfvanderlei@ltf.ufpb.br

Editor handled this article: Jorge M. David

*p*-anisaldehyde reagents, or by impregnating the plates in glass vats saturated with iodine vapors.

The identification or structural elucidation of the isolated compounds was carried out using spectroscopic methods ($^{1}H$ and $^{13}C$ nuclear magnetic resonance (NMR)) and 2D techniques (HSQC (heteronuclear single quantum correlation) and HMBC (heteronuclear multiple bond correlation)) using the BRUKER-ASCEND spectrometer operating at 400 MHz ($^{1}H$) and 100 MHz ($^{13}C$) and VARIAN operating at 500 MHz ($^{1}H$) and 125 MHz ($^{13}C$) and 200 MHz ($^{1}H$) and 50 MHz ($^{13}C$), using deuterated solvents ($CDCl_3$, DMSO-$d_6$ and $CD_3OD$). Chemical shifts ($\delta$) were expressed in parts *per* million (ppm) and coupling constants (*J*) in Hz.

**Botanical material**

The plant material (aerial parts) of *Pavonia malacophylla* were collected in the municipality of Santa Rita - Paraíba (7°7'42.473"S; 34°59'04.626"W) in June 2011. Botanical identification was carried out by Prof. Dr. Maria of Fátima Agra (CBioTec/UFPB) and an exsiccate was deposited in the Herbarium Prof. Lauro Pires Xavier (Agra 7038). This research was registered in the National System of Genetic Resource Management and Associated Traditional Knowledge (SisGen - A568B8A).

**Extraction and isolation of compounds**

The aerial parts of *Pavonia malacophylla* were dehydrated in an oven with circulating air at an average temperature of 40 °C for 96 h. Then, the sample was crushed with the aid of a mechanical mill, providing 1050 g of powder. All material was macerated with 95% ethanol for 72 h. The extractive solution obtained was filtered and concentrated in a rotary evaporator under reduced pressure at 40 °C, providing 403.0 g of crude ethanolic extract (CEE).

A sample of CEE (200.0 g) was subjected to vacuum liquid chromatography (VLC) using a Buchner funnel coupled to a kitassato (1 L), and silica gel 60 as stationary phase and hexane (Hex), ethyl acetate (EtOAc) and methanol (MeOH) as mobile phases, alone or in binary mixtures in increasing order of polarity (Hex; Hex:EtOAc (9:1; 7:3; 1:1; 3:7); EtOAc; EtOAc:MeOH (9:1; 7:3; 1:1) obtaining nine fractions that were concentrated in a rotary evaporator and then analyzed by TLC. The Hex:EtOAc (9:1) fraction (6.0 g) was fractionated in column chromatography (CC) using silica gel 60 and Hex, EtOAc and MeOH following the previously described methodology, obtaining nine subfractions. The Hex:EtOAc (9:1) subfraction (930.0 mg) was chromatographed in CC following the same methodology, resulting in 44 subfractions that were analyzed by TLC. It was found that subfractions 14-20 and 26-31 were pure, being coded as compounds **1** (35.0 mg) and **2** (28.0 mg), respectively.

The Hex:EtOAc (7:3) fraction (3.5 g) was chromatographed in CC following the previous methodology, obtaining 107 fractions (10 mL each) that were analyzed by TLC. Fractions 47-53 and 64-69 were isolated, the compounds coded as **3** (13.0 mg) and **4** and (22.0 mg), respectively.

The Hex:EtOAc (3:7) fraction (3.0 g) was subjected to the previous methodology, obtaining 68 fractions that were analyzed by TLC. The fractions 11 and 13 were considered pure and were coded as compounds **5** (15.0 mg) and **6** (12.0 mg), respectively. The combination of fractions 14-24 (220.0 mg) submitted to a CC using Sephadex LH-20 as stationary phase and MeOH and MeOH:$CHCl_3$ (1:1) as mobile phases led to the isolation of compounds **7** (10.0 mg) and **8** (10.0 mg).

The 100% EtOAc fraction (5.0 g) was subjected to CC, using Sephadex LH-20 as the stationary phase and MeOH and MeOH:$CHCl_3$ (1:1) as mobile phases. From this process, 42 fractions were obtained, which were analyzed by TLC. Subfraction 26-31 was found to be pure and was coded as compound **9** (25.0 mg).

An aliquot of the EtOAc:MeOH (9:1) fraction (5.0 g) was chromatographed using the methodology described previously. From this procedure, 56 fractions were obtained and analyzed by TLC. The subfraction 44-51 (85.0 mg) was subjected to another chromatography, adopting the same methodology. From this, 20 fractions were obtained and analyzed by TLC. The subfractions 15-17 (11.0 mg) and 18-20 (5.0 mg) appeared as pure yellow powders, being then coded as compounds **10** (11.0 mg) and **11** (5.0 mg), respectively. The subfraction 19-43 (714.0 mg) was subjected to the same methodology as subfraction 44-51, resulting in 19 fractions. From this process, the subfraction 6-8 (33.0 mg) was obtained, which appeared pure when analyzed by TLC, in various solvent systems, being coded as compound **12** (33.0 mg).

The EtOAc:MeOH (1:1) fraction (7.0 g) was chromatographed in a CC on Amberlite XAD-2 using $H_2O$, MeOH, Hex, acetone and EtOAc as mobile phases. From this procedure, the 100% MeOH subfraction (2.8 g) was chromatographed on Sephadex LH-20 using MeOH and MeOH:$CHCl_3$ (1:1) as mobile phases. Successive chromatographic columns were performed using Sephadex LH-20 as the stationary phase and MeOH and MeOH:$CHCl_3$ (1:1) as mobile phases, resulting in fractions that were analyzed by TLC and then coded as compounds **13** (18.0 mg) and **14** (10.0 mg).

Another portion of the CEE (160.0 g) was dissolved in an ethanol:water solution (7:3) with a final volume of 1 L and homogenized with the aid of a mechanical stirrer for 2 h. Subsequently, the hydroalcoholic solution was subjected to liquid-liquid chromatography, using Hex, $CHCl_3$ and EtOAc (4 × 500 mL, each solvent), in increasing order of polarity, accompanied by TLC analysis, provided 34.0 g of hexane phase (HP), 37.0 g of $CHCl_3$ phase (CP), 13.0 g of EtOAc phase (AEP), in addition to the hydroalcoholic phase (HAP) (72.0 g).

An aliquot of CP (20.0 g) was subjected to CC using silica gel 60 as the stationary phase and Hex, EtOAc, MeOH and $H_2O$ as mobile phases alone or in binary mixtures in an increasing degree of polarity, obtaining 67 fractions, which were concentrated in a rotary evaporator and combined through analysis in TLC. Fractions 15-16 and 29-30 were pure and were coded as compounds **15** (10.0 mg) and **16** (12.0 mg).

**Antimicrobial activity assay**

*Test microorganisms*

To evaluate antimicrobial activity, five strains of microorganisms were selected (*Staphylococcus aureus* ATCC 15656, *Streptococcus mutans* ATCC 25175, *Pseudomonas aeruginosa* ATCC 27853, *Escherichia coli* ATCC 25922 and *Candida albicans* ATCC 1106), obtained from the microbiological collection of the Oral Biology Laboratory, from the Health Sciences Center of the Federal University of Paraíba.

*Determination of minimum inhibitory concentration (MIC)*

Antifungal and antibacterial activities were determined using dilution assays in 96-well microplates in triplicate.

For the cultivation of bacteria and fungi, sterilized test tubes were used, where 0.6 mL of the bacterial/fungal inoculum was added with 7 mL of brain heart infusion (BHI) broth (for bacteria) and 7 mL of Sabouraud broth (for fungi). Then, the tubes were shaken and homogenized in the vortex, then taken to the oven at 35 ± 2 °C for 24 h for *S. aureus*, *S. mutans*, *E. coli* and *P. aeruginosa*, and 48 h for *C. albicans*. The cultivation of *S. mutans* was carried out using microaerophilia.

Stock solutions of extracts, fractions and compounds were prepared separately. These were weighed and mixed with a solution of 10% DMSO-$d_6$ and Tween 80 (5%) in a 1:1 ratio. The solutions were homogenized in the vortex, sonicated, and taken to an oven at 35 ± 2 °C.[18]

Secondary solutions SM1, SM2 and SM3 of the samples were prepared separately for three blocks of dilution series. For SM1, 1.5 mL of BHI broth was added with 1.5 mL of SM extracts/fractions/substances, described previously, both in the same proportion (1:1) (v/v), obtaining a final volume of 3 mL and an extract at a concentration of 500 µg mL$^{-1}$. For SM2, 2.5 mL of BHI broth were added with 0.5 mL of SM extract/substance, in the proportion (1:5) (v/v), obtaining a final volume of 3 mL and an extract at the concentration of 167 µg mL$^{-1}$. For SM3, 4.5 mL of BHI broth were added with 0.5 mL of extract/substance SM, in the proportion (1:9) (v/v), obtaining a final volume of 5 mL and an extract at the concentration of 100 µg mL$^{-1}$.

The preparation of the bacterial/fungal inoculum remained in an oven for 24 h of cultivation at 37 °C and 3 mL of the inoculum was removed from each tube and placed in Falcon tubes. Then, the tubes were centrifuged for 10 to 15 min, removing the supernatant and adding 240 µL of the inoculum with 4.8 mL of saline solution to the tube. Once the mixture was homogenized, it was placed in the oven for 1 h, vortexing every 15 min. After this rest, in an oven, the tubes were centrifuged again for 10 to 15 min and the supernatant was discarded and 2.4 mL of saline solution was added, homogenizing in the vortex.

The reading was then carried out on the spectrophotometer (OPTIMA) with an absorbance of 0.135 at a wavelength of 640 nm, corresponding to 1.6 × 10$^8$ CFU (colony forming unit) mL$^{-1}$, equivalent to 0.5 on the McFarland scale. After the incubation period, 35 µL of resazurin (100 µg mL$^{-1}$), prepared in an aqueous solution (1 mg, bring to volume 10 mL) was added to each hole, mixing the contents in the wells of the plate. Chlorhexidine was the antimicrobial used as a positive control.

## RESULTS AND DISCUSSION

### Identification of isolated compounds

Using 1D and 2D NMR spectroscopic methods, it was possible to identify and structurally elucidate 18 compounds from the aerial parts of *P. malacophylla*, including one aliphatic alcohol (**1**), three steroids (**2**) and two in mixture (**3a** and **3b**), three triterpenes, being two in mixture (**4a** and **4b**) and the compound **5**, four chlorophyll derivatives (**6-9**), six flavonoids (**10-15**) and one phenolic acid (**16**) (Figure 1).

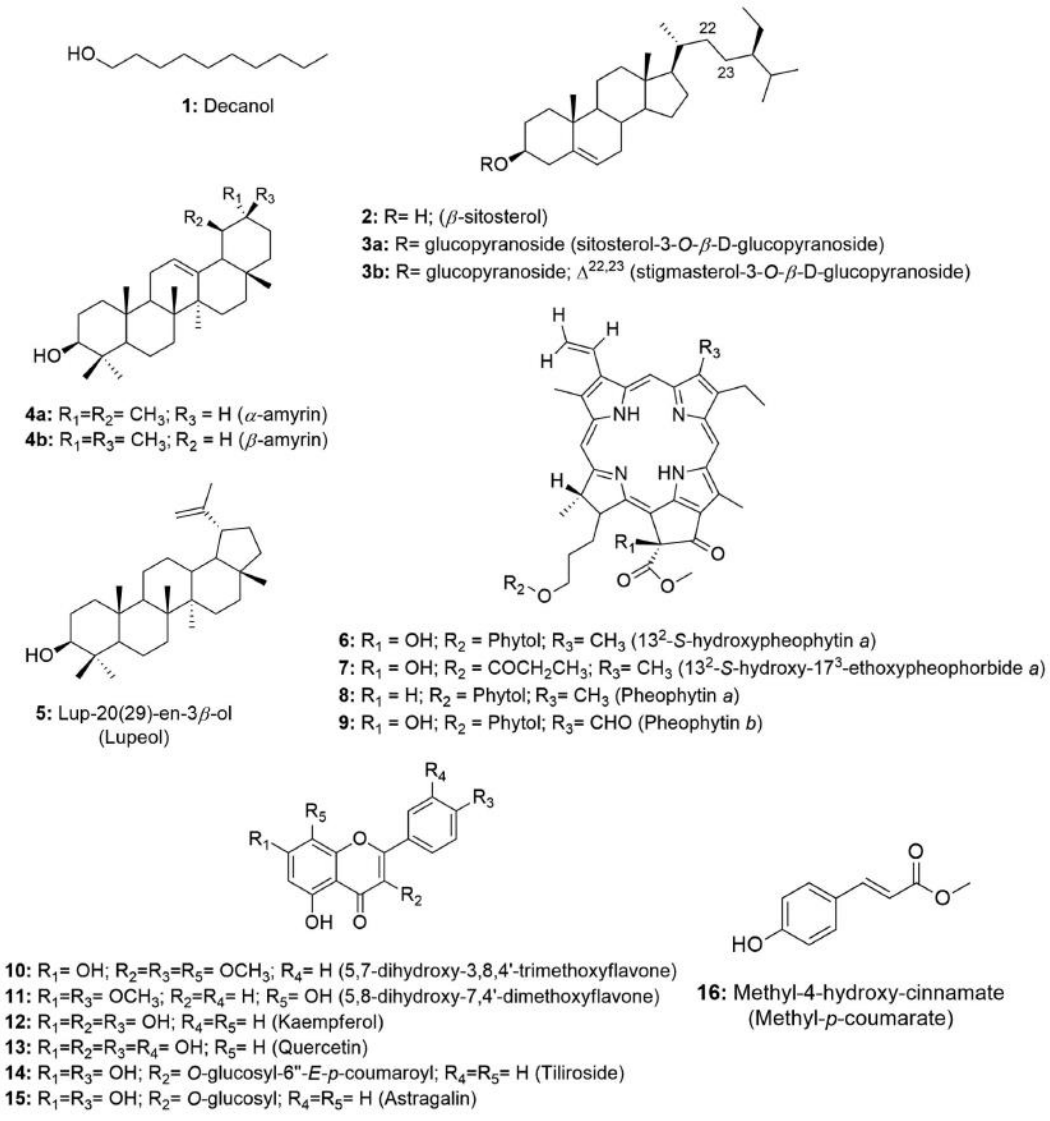



***Figure 1.*** *Compounds isolated from the aerial parts of Pavonia malacophylla (Malvaceae sensu lato)*

*5,7-Dihydroxy-3,8,4'-trimethoxyflavone (**10**)*

Melting point of 174-175 °C; $^1$H NMR (500 MHz, $CDCl_3$) $\delta$ 12.43 (s, 1H, 5-OH), 6.42 (s, 1H, s, H-6), 8.11 (d, 2H, *J* 10.0 Hz, H-2'/6'), 7.05 (d, 2H, *J* 9.0 Hz, H-3'/5'), 3.86 (s, 3H, 3-$OCH_3$), 3.99 (s, 3H, 8-$OCH_3$), 3.90 (s, 3H, 4'-$OCH_3$); $^{13}$C NMR (125 MHz, $CDCl_3$) $\delta$ 155.8 (C-2), 138.9 (C-3), 179.1 (C-4), 155.1 (C-5), 98.6 (C-6), 157.6 (C-7), 126.8 (C-8), 148.1 (C-9), 105.8 (C-10), 122.9 (C-1'), 130.2 (C-2'/6'), 114.4 (C-3'/5'), 161.9 (C-4'), 60.3 (3-$OCH_3$), 62.1 (8-$OCH_3$), 55.6 (4'-$OCH_3$). The $^1$H and $^{13}$C NMR data were in accordance with published data.[11]

*5,8-Dihydroxy-7,4'-dimethoxyflavone (**11**)*

Melting point of 269-270 °C; $^1$H NMR (500 MHz, $CDCl_3$) $\delta$ 12.43 (s, 1H, 5-OH), 6.86 (s, 1H, s, H-3), 6.55 (s, 1H, H-6), 8.11 (d, 2H, *J* 8.4 Hz, H-2'/6'), 7.12 (d, 2H, *J* 8.4 Hz, H-3'/5'), 3.90 (s, 3H, 7-$OCH_3$), 3.85 (s, 3H, 4'-$OCH_3$); $^{13}$C NMR (125 MHz, $CDCl_3$) $\delta$ 163.5 (C-2), 103.0 (C-3), 182.4 (C-4), 153.1 (C-5), 95.7 (C-6), 154.3 (C-7), 126.2 (C-8), 144.4 (C-9), 103.9 (C-10), 123.0 (C-1'), 128.5 (C-2'/6'), 114.5 (C-3'/5'), 162.4 (C-4'), 56.5 (7-$OCH_3$), 56.3 (4'-$OCH_3$), 55.6 (4'-$OCH_3$). $^1$H and $^{13}$C NMR data were in agreement with published data.[19]

*3,5,7,4'-Tetrahydroxyflavone (**12**)*

Melting point of 277-278 °C; $^1$H NMR (500 MHz, $CD_3OD$) $\delta$ 6.18 (d, *J* 2.0 Hz, 1H, H-6), 6.39 (d, *J* 2.0 Hz, 1H, H-8), 8.08 (d, 2H, *J* 8.9 Hz, H-2'/6'), 6.90 (d, 2H, *J* 8.9 Hz, H-3'/5'); $^{13}$C NMR (125 MHz, $CD_3OD$) $\delta$ 148.0 (C-2), 137.1 (C-3), 177.3 (C-4), 162.5 (C-5), 99.3 (C-6), 165.6 (C-7), 94.4 (C-8), 158.2 (C-9), 103.7 (C-10), 123.7 (C-1'), 130.6 (C-2'/6'), 116.3 (C-3'/5'), 160.5 (C-4'). $^1$H and $^{13}$C NMR data were in agreement with published data.[20]

*3,5,7,3',4'-Pentahydroxyflavone (**13**)*

Melting point of 314-315 °C; $^1$H NMR (500 MHz, $CD_3OD$) $\delta$ 6.17 (d, *J* 2.0 Hz, 1H, H-6), 6.37 (d, *J* 2.0 Hz, 1H, H-8), 7.72 (d, 1H, *J* 2.0 Hz, H-2'), 6.87 (d, 1H, *J* 8.5 Hz, H-5'), 7.62 (dd, *J* 8.5 and 2.0 Hz, 1H, H-6'); $^{13}$C NMR (125 MHz, $CD_3OD$) $\delta$ 148.0 (C-2), 137.2 (C-3), 177.3 (C-4), 162.5 (C-5), 99.2 (C-6), 165.6 (C-7), 94.4 (C-8), 158.2 (C-9), 104.5 (C-10), 124.1 (C-1'), 116.2 (C-2'), 146.2 (C-3'), 148.7 (C-4'), 116.0 (C-5'), 121.6 (C-6'). $^1$H and $^{13}$C NMR data were in agreement with published data.[8]

*Kaempferol 3-O-β-D-(6"-E-p-coumaroyl) glucoside (tiliroside) (**14**)*

Melting point of 254-255 °C; $^1$H NMR (200 MHz, $CD_3OD$) $\delta$ 6.11 (d, *J* 2.0 Hz, 1H, H-6), 6.27 (d, *J* 2.0 Hz, 1H, H-8), 7.96 (d, 1H, *J* 9.0 Hz, H-2'/6'), 6.79 (d, 1H, *J* 9.0 Hz, H-3'/5'), 5.23 (d, *J* 7.6 Hz, 1H, H-1"), 3.15-3.47 (m, H-2"/3"/4"/5"), 4.06 (dd, *J* 11.8 and 2.2 Hz, H-6$^a$"), 4.19 (dd, *J* 11.6 and 2.2 Hz, H-6$^b$"), 7.25 (d, *J* 8.6 Hz, H-2"'/6"'), 6.77 (d, *J* 8.6 Hz, H-3"'/5"'), 6.05 (d, *J* 16.0 Hz, 1H, H-α), 7.38 (d, *J* 16.0 Hz, 1H, H-β); $^{13}$C NMR (50 MHz, $CD_3OD$) $\delta$ 159.2 (C-2), 135.1 (C-3), 179.3 (C-4), 162.8 (C-5), 99.9 (C-6), 165.8 (C-7), 94.8 (C-8), 158.2 (C-9), 105.5 (C-10), 122.6 (C-1'), 132.2 (C-2'/6'), 115.9 (C-3'/5'), 161.4 (C-4'), 104.0 (C-1"), 75.7 (C-2"), 77.9 (C-3"), 71.6 (C-4"), 75.7 (C-5"), 64.3 (C-6"), 127.0 (C-1"'), 131.1 (C-2"'/6"'), 116.7 (C-3"'/5"'), 161.1 (C-4"'), 114.6 (C-α), 146.5 (C-β), 168.8 (COO). $^1$H and $^{13}$C NMR data were in agreement with published data.[8]

*Kaempferol 3-O-β-D-glucopyranoside (astragalin) (**15**)*

Melting point of 162-163 °C; $^1$H NMR (500 MHz, $CD_3OD$) $\delta$ 6.12 (d, *J* 2.0 Hz, 1H, H-6), 6.29 (d, *J* 2.0 Hz, 1H, H-8), 8.03 (d, 2H, *J* 9.0 Hz, H-2'/6'), 6.87 (d, 2H, *J* 9.0 Hz, H-3'/5'), 5.14 (d, *J* 7.5 Hz, 1H, H-1"), 3.17-3.21 (m, H-2"), 3.41-3.44 (m, H-3"/4"/5"), 3.54 (dd, *J* 10.4 and 3.9 Hz, H-6$^a$"), 3.68 (dd, *J* 11.9 and 2.4 Hz, H-6$^b$"); $^{13}$C NMR (125 MHz, $CD_3OD$) $\delta$ 158.5 (C-2), 135.3 (C-3), 178.9 (C-4), 162.7 (C-5), 101.3 (C-6), 170.3 (C-7), 95.8 (C-8), 158.8 (C-9), 104.4 (C-10), 122.8 (C-1'), 132.2 (C-2'/6'), 116.1 (C-3'/5'), 161.6 (C-4'), 104.6 (C-1"), 75.7 (C-2"), 78.0 (C-3"), 71.3 (C-4"), 78.3 (C-5"), 62.6 (C-6"). $^1$H and $^{13}$C NMR data were in agreement with published data.[21]

*Methyl-4-hydroxycinnamate (**16**)*

Melting point of 135-136 °C; $^1$H NMR (500 MHz, $CDCl_3$) $\delta$ 7.42 (d, *J* 8.7 Hz, 2H, H-2/6), 6.84 (d, *J* 8.7 Hz, 2H, H-3/5), 7.63 (d, *J* 16.0 Hz, 1H, H-7), 6.29 (d, *J* 16.0 Hz, 1H, H-8), 3.79 (s, 3H, $OCH_3$); $^{13}$C NMR (125 MHz, $CDCl_3$) $\delta$ 127.2 (C-1), 130.1 (C-2/6), 116.1 (C-3/5), 158.2 (C-4), 144.9 (C-7), 115.2 (C-8), 168.1 (C-9), 51.8 ($OCH_3$). $^1$H and $^{13}$C NMR data were in agreement with published data.[22]

Compound **1** was isolated as a viscous oil and identified as the aliphatic alcohol decanol, a compound produced by plants with ecological relevance that acts as a pesticide in the control of arthropod pests such as *Cimex lectularius* and as a plant growth regulator in agriculture.[23,24] Decanol showed good bactericidal activity due to its ability to damage the cell envelope of *Mycobacteria* species. Furthermore, the compound reduced biofilm formation by *M. smegmatis* at concentrations of 0.1 and 0.2 mM, lower than its MIC which was 0.4 mM.[25] This compound was previously reported in *Helicteres velutina* and *Helicteres eichleri*, species of Malvaceae *sensu lato*[26,27] and for the first time in the genus *Pavonia*.

Compound **2** showed melting point of 141-142 °C and was identified as β-sitosterol and compounds **3a** and **3b** were identified as a mixture of two glycosylated phytosteroids: sitosterol-3-*O*-β-D-glucopyranoside and stigmasterol-3-*O*-β-D-glucopyranoside, respectively. These compounds are widely found as components of plant cell walls and membranes. Some activities are described in the literature[28-32] for the compounds, such as anti-inflammatory, analgesic, anthelmintic, antimutagenic, hypocholesterolemic, antidiabetic, antioxidant and antimicrobial. These compounds are widely found among species of the Malvaceae *sensu lato* family,[27,33] but isolated for the first time in the species *P. malacophylla*.

$^1$H NMR analysis of compounds **4a** and **4b** showed absorptions for two olefinic hydrogens at $\delta_H$ 5.16 (t, *J* 3.0 Hz) and $\delta_H$ 5.10 (t, *J* 4.0 Hz), indicating the presence of double bonds, suggesting that the compounds would be two triterpenes with unsaturation between C-12 and C-13. The hypothesis that it would be a mixture of triterpenes was corroborated by the characteristic signs of non-hydrogenated olefinic carbons at $\delta_C$ 145.1 (C-13) and monohydrogenated carbons at $\delta_C$ 121.6 (C-12) of triterpenes from the oleanane series, as well as the signs of non-hydrogenated olefinic carbons at $\delta_C$ 139.5 (C-13) and monohydrogenated at $\delta_C$ 124.3 (C-12) of ursane series triterpenes. Furthermore, it was shown that C-13 of the ursane series ($\delta_C$ 139.5) was more protected than C-13 of the oleanane series ($\delta_C$ 145.1), a fact due to the γ-gauche effect of methyl C-29 in the C-13 of the ursane series. Thus, compounds **4a** and **4b** were identified as a mixture of triterpenes from the ursane (α-amyrin) and oleanane (β-amyrin) series, respectively, isolated for the first time in the genus *Pavonia*.[34,35] A literature[36] reports for these triterpenes various activities such as anti-inflammatory, gastroprotective, anti-allergic, and antinociceptive.

The analysis of $^1$H and $^{13}$C NMR spectral data compared with literature data allowed us to verify that compound **5** would be lup-20(29)-en-3β-ol, known as lupeol,[37] which showed a melting point of 215-216 °C. This compound is widely distributed in the plant kingdom, including in species of Malvaceae *sensu lato*, such as *Herissantia tiubae*, *Helicteres eichleri*, *Waltheria viscosissima* and *Pavonia distinguenda*.[7,26,33,38] According to studies,[39-43] this

compound has great potential acting as an anti-inflammatory, anticancer, antidiabetic, cardioprotective, skin protective, antiprotozoal, antimicrobial, nephroprotective, antiangiogenic and hypocholesterolemic agent.

The $^1$H and $^{13}$C NMR spectral data of compounds **6**, **7**, **8** and **9** indicated that they are chlorophyll derivatives. Comparisons with literature data led to identifying the compounds as 13$^2$-*S*-hydroxypheophytin *a* (**6**),[44] 13$^2$-*S*-hydroxy-17$^3$-ethoxypheophorbide *a* (**7**),[45] pheophytin *a* (**8**),[10] and pheophytin *b* (**9**),[44] previously reported in species of Malvaceae *sensu lato*: *Wissadula periplocifolia*, *Sida rhombifolia*, *Sida galheirensis*, *Sidastrum micranthum*, *Helicteres velutina*, *Pavonia glazioviana*.[9,11,27,45,46]

The analysis of one and two-dimensional $^1$H and $^{13}$C NMR spectral data, together with comparisons with literature data,[8,11,19] allowed us to identify compound **10** as 5,7-dihydroxy-3,8,4'-trimethoxyflavone and compound **11** as being 5,8-dihydroxy-7,4'-dimethoxyflavone (7,4'-di-*O*-methylisoscutelarein), flavonoids previously isolated in species belonging to the Malvaceae *sensu lato* family.

The antimicrobial activity of flavonoids has been suggested according to their chemical structure, especially the number and positions of methoxyl and hydroxyl groups. The effect of *O*-methylation on flavonoids has been reported in the literature with reduced reactivity of hydroxyl groups and increased lipophilicity of these compounds, thus promoting an improvement in antimicrobial activity.[47,48]

Compounds **12**, **13**, **14** and **15** were isolated as yellowish powders. Their $^1$H and $^{13}$C NMR spectra showed signals in the region of aromatic hydrogens compatible with flavonoids, making it possible to identify them as 3,5,7,4'-tetrahydroxyflavone (kaempferol) (**12**), 3,5,7,3',4'-pentahydroxyflavone (quercetin) (**13**), kaempferol 3-*O*-β-D-(6"-*E*-*p*-coumaroyl) glycoside (tiliroside) (**14**) and kaempferol 3-*O*-β-D-glucopyranoside (astragalin) (**15**).

The astragalin was treated against fungal cells producing good antimicrobial and significant antibiofilm activity. Astragalin affected the integrity of the fungal cell membrane and had no cytotoxic effect on human gingival fibroblast cells. It also worked to reduce the expression of genes that encode efflux pumps (CDR1), and when combined with an antifungal drug, it increased its concentration inside cells, making it a therapeutic option for candidiasis.[49]

Compound **16** was isolated as a white powder. Its $^1$H NMR spectrum exhibited signals in the region of aromatic hydrogens, with two doublets at $\delta_H$ 7.42 and $\delta_H$ 6.84 (*J* 8.7 Hz) with an integral for two hydrogens each and with an *ortho* coupling constant, suggesting the presence of an AA'BB' aromatic system.[50] Two other doublets were evidenced in $\delta_H$ 7.63 and $\delta_H$ 6.29 (*J* 16.0 Hz) with an integral for one hydrogen each, equivalent to the pair of hydrogens linked to the olefinic carbons and *trans*-type coupling constants, signals attributed to the hydrogens H-7 and H-8 of the caffeoyl unit, respectively. A signal consistent with methoxylic hydrogens in $\delta_H$ 3.79 with an integral for 3H suggested this group as a substituent in its structure.[22]

When evaluating the expansions of the $^{13}$C NMR spectrum, signals were evidenced for 10 carbon atoms. The signal at $\delta_C$ 158.2 was attributed to C-4, due to its deprotection in relation to other aromatic carbons, due to the electronegative effect of the hydroxyl.[51] Absorptions at $\delta_C$ 127.2 and $\delta_C$ 168.1 were consistent with the quaternary carbons C-1 and C-9, while signals at $\delta_C$ 130.1 and $\delta_C$ 116.1 were attributed to the methine carbon sets of the AA'BB' (C-2/C-6 and C-3/C-5), respectively. The chemical shifts at $\delta_C$ 144.9 and $\delta_C$ 115.2 were compatible with those of the C-7 and C-8 *trans* coupling system. The only methyl carbon signal was evident at $\delta_C$ 51.8, thus confirming the proposal observed in the $^1$H NMR spectrum. Two-dimensional HSQC and HMBC spectra of compound **16** confirmed the proposed molecule.[52]

The compilation of spectral data and comparison with literature data[10,52] allowed the identification of substance **16** as methyl-4-hydroxy-cinnamate (methyl-*p*-coumarate). This compound was previously isolated in the species *Hibiscus sabdariffa*[53] and *Abutilon indicum*,[54] but reported for the first time in the genus *Pavonia*. Few reports of activity with this phenolic acid show its potency against cells of the acute myeloid lineage in leukemias,[55] inhibition of melanoma formation[56] and antifungal activity against *Alternaria alternata*.[57]

## Biological assay

The antimicrobial activities of all tested plant drugs are expressed in Table 1. For the *Escherichia coli* ATCC 25992 strain, the minimum inhibitory concentrations (MIC) of all fractions and extract were 400 μg mL$^{-1}$ and for the isolated substances the MIC was 300 and 350 μg mL$^{-1}$. For *Staphylococcus aureus* ATCC 15656, only the EtOAc and 17$^3$-ethoxypheophorbide *a* fractions presented an MIC of 400 and 250 μg mL$^{-1}$, respectively. For *Candida albicans* ATCC 1106, only the EtOAc:MeOH (9:1) fraction showed an MIC of 400 μg mL$^{-1}$, when compared with the chlorhexidine standard.

The bioassays performed in this study were carried out using CEE, fractions and compounds isolated against bacterial strains and a yeast strain. The results obtained indicated that all tested samples had an inhibitory effect on the *Escherichia coli* strain (Table 1).

**Table 1.** Minimum inhibitory concentrations (MIC) of the extract, fractions and isolated substances of *Pavonia malacophylla*

| Sample | Microorganism MIC / (μg mL$^{-1}$) | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| | *Streptococcus mutans* ATCC 25175 | *Staphylococcus aureus* ATCC 15656 | *Pseudomonas aeruginosa* ATCC 27853 | *Escherichia coli* ATCC 25922 | *Candida albicans* ATCC 1106 |
| CEE | – | – | – | 400 | – |
| Fr. Hex:EtOAc (9:1) | – | – | – | 400 | 400 |
| Fr. Hex:EtOAc (1:1) | – | – | – | 400 | – |
| Fr. EtOAc 100% | – | 400 | – | 400 | – |
| Fr. EtOAc:MeOH (9:1) | – | – | – | 400 | – |
| Fr. EtOAc:MeOH (1:1) | – | – | – | 400 | – |
| α and β-amyrin | – | – | – | 300 | – |
| 17$^3$-ethoxypheophorbide *a* | – | 250 | – | 350 | – |
| Tiliroside | – | – | – | 350 | – |
| Chlorhexidine | 25 | 15 | 8 | 70 | 64 |

CEE: crude ethanolic extract; Fr.: fraction; (–): growth of the microorganism.

The Hex:EtOAc fraction (9:1) promoted activity against the strain of *Candida albicans* and *Escherichia coli* with an MIC of 400 μg mL$^{-1}$ for both microorganisms, and this action can be justified by the presence of other compounds in the sample, not having specificity between the bacterial and fungal strains tested.

The compounds α and β-amyrin (**4a/4b**), isolated from this fraction, were evaluated as a mixture of triterpenes enhancing antimicrobial activity against the *Escherichia coli* strain, with an MIC of 300 μg mL$^{-1}$ when compared to its fraction from Hex:EtOAc (9:1) and its CEE, both with an MIC of 400 μg mL$^{-1}$. This result was also better when compared to the activity of just the triterpene β-amyrin against the same bacterial strains with an MIC of 10.0 mg mL$^{-1}$.[58]

Furthermore, in one study[59] the *in vitro* antibacterial activity against multi-resistant strains of *Staphylococcus aureus* of a mixture of α-amyrin and β-amyrin was demonstrated through synergistic action with antibiotics. In this same study with *in silico* tests, these compounds obtained responses due to the presence of the synergistic efflux mechanism, showing greater interaction with the MepA and NorA receptors, which are binding sites for conventional antibiotics, such as ciprofloxacin and norfloxacin, making this association a potential candidate for efflux pump inhibitor.

Many reports in the literature[60-63] still describe the antitumor, anti-inflammatory, antioxidant, hepatoprotective and antimicrobial potential of terpenoids. The good antimicrobial activity of pentacyclic triterpenes is linked to changes in the structure, morphology and functioning of bacterial cells, with difficulty in biofilm formation, adhesin production and gene expression.[64,65]

Gerola *et al.*[66] demonstrated the antimicrobial effect of chlorophyll-derived compounds, including pheophorbides. With diverse applicability, pheophytin *b* has shown potential for the production of biofilms, being a natural biological material used in applications such as electrochemical sensors.[67] Another study carried out by de Medeiros *et al.*[68] with pheophytin *b* demonstrated significant activity against strains of *Staphylococcus aureus*, *Pseudomonas aeruginosa* and *Escherichia coli* at concentrations ranging from 25 to 50 μg mL$^{-1}$.

From this, it was decided to test the compound 17$^3$-ethoxy-pheophorbid *a* (**7**), since pheophytins have this antimicrobial power and share the same main skeleton, the porphyrin nucleus.

The EtOAc 100% fraction and the compound 17$^3$-ethoxy-pheophorbid *a* (**7**) tested showed activity of 400 and 250 μg mL$^{-1}$, respectively, against the *Staphylococcus aureus* strain, and both samples showed activity against *Escherichia coli* with MIC of 400 and 350 μg mL$^{-1}$, respectively[1]. A study carried out by Gomes *et al.*[46] further showed that pheophytin *a* also has a significant antimicrobial effect against the bacterial and fungal strains tested, where the minimum inhibitory concentrations ranged from 38 to 150 μg mL$^{-1}$.

The tested fraction EtOAc:MeOH (9:1) presented an MIC of 400 μg mL$^{-1}$ against *Candida albicans*. From this fraction, a glycosylated flavone, tiliroside (**14**), was isolated, which showed good antimicrobial activity against a strain of *Escherichia coli*, with an MIC of 350 μg mL$^{-1}$.

Tiliroside has an amphipathic characteristic, due to the presence of a *p*-coumaroyl group in its chemical structure, ensuring greater lipophilicity.[69] This physicochemical characteristic determines its antimicrobial power, as it can bind to protein structures, such as efflux pumps produced by resistant bacteria, preventing other substances from diffusing to the outside of the microbial cell and not exerting their bactericidal/bacteriostatic activity.[70]

Hence to support this evidence, in our study *E. coli* was the only strain susceptible to all tested fractions and isolated substances < 400 μg mL$^{-1}$ (Table 1). These results suggest that Gram-negative bacteria with the outer membrane containing lipopolysaccharide are potentially more susceptible than Gram-positive microorganisms.

Tiliroside isolated from the aerial parts of *Herissantia tiubae* demonstrated *in vitro* modulating activity of bacterial resistance against strains of *Staphylococcus aureus* (MIC = 256 μg mL$^{-1}$), modulating the activity of the tested antibiotics, which when administered concomitantly, reduced the MIC of norfloxacin and ciprofloxacin (16 times), lomefloxacin (four times) and ofloxacin (twice), and reduction to acriflavine (128 times), suggesting a possible inhibitor of the efflux pump in bacteria.[69]

Following recent classifications for antimicrobial activity, the extract, fractions and isolated compounds of *Pavonia malacophylla* reached levels of moderate activity (100-625 μg mL$^{-1}$) and with potentially useful activities.[71,72]

In this way, the antimicrobial activity presented by the extract, fractions and compounds isolated from *Pavonia malacophylla* can determine its main role in the environment, which is protection against pathogenic agents, thus reinforcing the need to intensify and deepen the mechanisms of action of these promising substances with antimicrobial potential.

## CONCLUSIONS

The phytochemical studies with aerial parts of *Pavonia malacophylla* resulted in isolation and identification of 18 compounds, including one alcohol, three steroids, three triterpenes, four chlorophyll derivatives, six flavonoids and one phenolic acid.

The crude ethanolic extract, fractions, and four isolated compounds (α and β-amyrin, 17$^3$-ethoxypheophorbide *a* and tiliroside) were analyzed against the *Escherichia coli*, *Candida albicans*, and *Staphylococcus aureus* strains, showing activity in concentrations ranging from 250 to 400 μg mL$^{-1}$, thus providing an antimicrobial alternative in controlling infections. These results contributing to the chemotaxonomic and ethnopharmacological knowledge of the Malvaceae *sensu lato* family.

## ACKNOWLEDGMENTS

The authors would like to thank the National Council for Scientific and Technological Development, Brazil (CNPq) for the financial support, and the Coordination for the Improvement of Higher Education Personnel - Brazil (CAPES) and the Multiuser Characterization and Analysis Laboratory (LMCA-UFPB) for obtaining spectra, and to the Oral Biology Laboratory (CCS-UFPB) for assistance with microbiological tests.

## AUTHOR CONTRIBUTIONS

JBLA (author), OCS, WAMQ, DAF, BFAR, MFA and MFVS carried out the phytochemical study and identification of the compounds. MFVS supervised the work. FCS performed the microbiological tests.

## REFERENCES

1. Keihanian, F.; Saeidinia, A.; Abbasi, K.; Keihanian, F.; *Infect. Drug Resist.* **2018**, *11*, 1723. [Crossref]
2. Reygaert, W. C.; *AIMS Microbiol.* **2018**, *4*, 482. [Crossref]
3. Cox, G.; Wright, G. D.; *Int. J. Med. Microbiol.* **2013**, *303*, 287. [Crossref]
4. Blair, J. M. A.; Webber, M. A.; Baylay, A. J.; Ogbolu, D. O.; Piddock, L. J. V.; *Nat. Rev. Microbiol.* **2015**, *13*, 42. [Crossref]
5. Brito-Filho, S. G.; Maciel, J. K. S.; Teles, Y. C. F.; Fernandes,

M. M. M. S.; Chaves, O. S.; Ferreira, M. D. L.; Fernandes, P. D.; Felix, L. P.; Cirino, I. C. S.; Siqueira-Júnior, J. P.; Braz-Filho, R.; de Souza, M. F. V.; *Rev. Bras. Farmacogn.* **2017**, *27*, 453. [Crossref]
6. Mohammed, F.; Shifa, S. P.; *J. Pharmacogn. Phytochem.* **2019**, *8*, 1887. [Link] accessed in April 2025
7. Silva, D. A.; Falcão-Silva, V. S.; Gomes, A. Y. S.; da Costa, D. A.; Lemos, V. S.; Agra, M. F.; Braz-Filho, R.; Siqueira-Junior, J. P.; de Souza, M. F. V.; *Pharm. Biol.* **2009**, *47*, 279. [Crossref]
8. Gomes, R. A.; Ramirez, R. R. A.; Maciel, J. K. S.; Agra, M. F.; de Souza, M. F. V.; Falcão-Silva, V. S.; Siqueira-Junior, J. P.; *Quim. Nova* **2011**, *34*, 1385. [Crossref]
9. Teles, Y. C. F.; Gomes, R. A.; Oliveira, M. S.; de Lucena, K. L.; do Nascimento, J. S.; Agra, M. F.; Igoli, J. O.; Gray, A. I.; de Souza, M. F. V.; *Quim. Nova* **2014**, *37*, 1491. [Crossref]
10. Chaves, O. S.; Teles, Y. C. F.; Monteiro, M. M. O.; Mendes Junior, L. G.; Agra, M. F.; Braga, V. A.; Silva, T. M. S.; de Souza, M. F. V.; *Molecules* **2017**, *22*, 94. [Crossref]
11. Oliveira, M. S.; Chaves, O. S.; Teles, Y. C. F.; Fernandes, D. A.; Macaúbas-Silva, C.; Queiroz, W. A. M.; Lima, J. B.; Mazzotti, M. R. R. M.; Lima, E. O.; Fernandes, G. L.; Conceição, A. S.; de Souza, M. F. V.; *Quim. Nova* **2025**, *48*, e-20250011. [Crossref]
12. The Plant List, version 1.1, *Malvaceae*, http://www.theplantlist.org/1.1/browse/A/Malvaceae/, accessed in April 2025.
13. Grings, M.; Boldrini, I. I.; *Revista Brasileira de Biociências* **2013**, *11*, 352. [Link] accessed in April 2025
14. de Albuquerque, J. B. L.; da Silva, C. M.; Fernandes, D. A.; de Souza, P. I. V.; de Souza, M. F. V.; *Quim. Nova* **2022**, *45*, 977. [Crossref]
15. Furtado, L. G.; Souza, R. C.; van den Berg, M. E.; *Boletim do Museu Paraense Emílio Goeldi, Nova Série: Antropologia* **1978**, *70*, 01. [Link] accessed in April 2025
16. Ribeiro, D. A.; de Oliveira, L. G. S.; de Macêdo, D. G.; de Menezes, I. R. A.; da Costa, J. G. M.; da Silva, M. A. P.; Lacerda, S. R.; Souza, M. M. A.; *J. Ethnopharmacol.* **2014**, *155*, 1522. [Crossref]
17. Lima, B. A. T.; Teles, Y. C. F.; Monteiro, G. F.; Silva, C. M.; Chaves, O. S.; Souza, M. F. V.; *3º Simpósio Nordestino de Química*; Campina Grande, Brasil, 2017. [Link] accessed in April 2025
18. Sampaio, F. C.; Pereira, M. S. V.; Dias, C. S.; Costa, V. C. O.; Conde, N. C. O.; Buzalaf, M. A. R.; *J. Ethnopharmacol.* **2009**, *124*, 289. [Crossref]
19. Teles, Y. C. F.; Chaves, O. S.; Agra, M. F.; Batista, L. M.; de Queiroz, A. C.; de Araújo, M. V.; Alexandre-Moreira, M. S.; Braz-Filho, R.; de Souza, M. F. V.; *Rev. Bras. Farmacogn.* **2015**, *25*, 363. [Crossref]
20. Maciel, J. K. S.; Chaves, O. S.; Brito Filho, S. G.; Teles, Y. C. F.; Fernandes, M. G.; Assis, T. S.; De Andrade, A. P.; Felix, L. P.; Silva, T. M. S.; Ramos, N. S. M.; Silva, G. R.; De Souza, M. F. V.; *Molecules* **2016**, *21*, 11. [Crossref]
21. Dantas, C. A. G.: *Estudo Fitoquímico e Investigação da Atividade Imunomoduladora de Metabólitos Secundários de Erythroxylum simonis Plowman (Erythroxylaceae)*; Dissertação de Mestrado, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, Brasil, 2017. [Link] accessed in April 2025
22. Sahidin, I.; Bahrun, A.; Taufik, M.; Yodha, A. W. M.; Sabandar, C. W.; Imran, I.; Kadidae, L. O.; Darmawan, A.; Widodo, H.; Diantini, A.; *J. Nat. Pharm. Prod.* **2019**, *15*, e64788. [Crossref]
23. Perry, S. C.; *US pat.US20140303262* **2014**.
24. Xie, F.; *China pat. CN107691525* **2018**.
25. Mukherjee, K.; Tribedi, P.; Mukhopadhyay, B.; Sil, A. K.; *FEMS Microbiol. Lett.* **2013**, *338*, 177. [Crossref]
26. de Assis, E. B.: *Estudo Fitoquímico e Abordagem sobre a Atividade Larvicida de Helicteres eichleri K. Schum (Sterculiaceae) Frente a Aedes aegypti L. (Diptera: Culicidae)*; Dissertação de Mestrado, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, Brasil, 2019. [Link] accessed in April 2025
27. Fernandes, D. A.; Souza, M. S. R.; Teles, Y. C. F.; Oliveira, L. H. G.; Lima, J. B.; Conceição, A. S.; Nunes, F. C.; Silva, T. M. S.; de Souza, M. F. V.; *Molecules* **2018**, *23*, 2784. [Crossref]
28. Villaseñor, I. M.; Angelada, J.; Canlas, A. P.; Echegoyen, D.; *Phytother. Res.* **2002**, *16*, 417. [Crossref]
29. Loizou, S.; Lekakis, I.; Chrousos, G. P.; Moutsatsou, P.; *Mol. Nutr. Food Res.* **2010**, *54*, 551. [Crossref]
30. Gupta, R.; Sharma, A. K.; Dobhal, M. P.; Sharma, M. C.; Gupta, R. S.; *J. Diabetes* **2011**, *3*, 29. [Crossref]
31. Baskar, A. A.; Al Numair, K. S.; Paulraj, M. G.; Alsaif, M. A.; Muamar, M. A.; Ignacimuthu, S.; *J. Med. Food* **2012**, *15*, 335. [Crossref]
32. Subramaniam, S.; Keerthiraja, M.; Sivasubramanian, A.; *Rev. Bras. Farmacogn.* **2014**, *24*, 44. [Crossref]
33. Ferreira, M. D. L.; Fernandes, D. A.; Nunes, F. C.; Teles, Y. C. F.; Rolim, Y. M.; da Silva, C. M.; de Albuquerque, J. B. L.; Agra, M. F.; de Souza, M. F. V.; *Rev. Bras. Farmacogn.* **2019**, *29*, 582. [Crossref]
34. Bandeira, P. N.; Lemos, T. L. G.; Costa, S. M. O.; dos Santos, H. S.; *Rev. Bras. Farmacogn.* **2007**, *17*, 204. [Crossref]
35. Pereira Júnior, R. J.: *Estudo Fitoquímico de Stachytarpheta sessilis Moldenk*; Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, Brasil, 2008. [Link] accessed in April 2025
36. Barros, F. W. A.; Bandeira, P. N.; Lima, D. J. B.; Meira, A. S.; de Farias, S. S.; Albuquerque, M. R. J. R.; dos Santos, H. S.; Lemos, T. L. G.; de Morais, M. O.; Costa-Lotufo, L. V.; Pessoa, C. O.; *Bioorg. Med. Chem.* **2011**, *19*, 1268. [Crossref]
37. Alhassam, A. M.; Ahmed, Q. U.; Latip, J.; Shah, S. A. A.; Khan, A. A. Y. F.; Sarian, M. N.; Wahab, R. A.; Taher, M.; Abdullahi, M. I.; Khatib, A.; *S. Afr. J. Bot.* **2018**, *116*, 16. [Crossref]
38. Garcia, C. M.: *Estudo Fitoquímico e Atividade Biológica de Pavonia distinguenda A. St.-Hill. et Naudin e Dorstenia brasiliensis Lam.*; Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, Brasil, 2007. [Link] accessed in April 2025
39. Rauth, S.; Ray, S.; Bhattacharyya, S.; Mehrotra, D. G.; Alam, N.; Mondal, G.; Nath, P.; Roy, A.; Biswas, J.; Murmu, N.; *Mol. Cell. Biochem.* **2016**, *417*, 97. [Crossref]
40. Amoussa, A. M. O.; Lagnika, L.; Boujot, M.; Vonthron-Senecheau, C.; Sanni, A.; *BMC Complementary Altern. Med.* **2016**, *16*, 284. [Crossref]
41. Devkar, R. A.; Chaudhary, S.; Adepu, S.; Xavier, S. K.; Chandrashekar, K. S.; Setty, M. M.; *Pharm. Biol.* **2016**, *54*, 1237. [Crossref]
42. Singh, A.; Mukhtar, H. M.; Kaur, H.; Kaur, L.; *Nat. Prod. Res.* **2020**, *34*, 2514. [Crossref]
43. Thirumalaisamy, R.; Amenn, F.; Subramanian, A.; Selvankumar, T.; Alwakeel, S. S.; Govarthanan, M.; *Int. J. Pept. Res. Ther.* **2020**, *26*, 2179. [Crossref]
44. de Brito-Filho, S. G.; Fernandes, M. G.; Chaves, O. S.; Chaves, M. C. O.; Araruna, F. B.; Eiras, C.; Leite, J. R. S. A.; Agra, M. F.; Braz-Filho, R.; de Souza, M. F. V.; *Quim. Nova* **2014**, *37*, 603. [Crossref]
45. Chaves, O. S.; Gomes, R. A.; Tomaz, A. C. A.; Fernandes, M. G.; Mendes-Junior, L. G.; Agra, M. F.; Braga, V. A.; de Souza, M. F. V.; *Molecules* **2013**, *18*, 2769. [Crossref]
46. Gomes, R. A.; Teles, Y. C. F.; Pereira, F. O.; Rodrigues, L. A. S.; Lima, E. O.; Agra, M. F.; de Souza, M. F. V.; *Braz. J. Pharm. Sci.* **2015**, *51*, 861. [Crossref]
47. Liu, Y.; Fernie, A. R.; Tohge, T.; *Plants* **2022**, *11*, 564. [Crossref]
48. Förster, C.; Handrick, V.; Ding, Y.; Nakamura, Y.; Paetz, C.; Schneider, B.; Castro-Falcón, G.; Hughes, C. C.; Luck, K.; Poosapati, S.; Kunert, G.; Huffaker, A.; Gershenzon, J.; Schmelz, E. A.; Köllner, T. G.; *Plant Physiol.* **2022**, *188*, 167. [Crossref]
49. Ivanov, M.; Kannan, A.; Stojković, D.; Glamočlija, J.; Grdadolnik, S. G.; Sanglard, D.; Soković, M.; *EXCLI Journal* **2020**, *19*, 1436. [Crossref]
50. Moura, A. C. S.; Vilegas, W.; dos Santos, L. C.; *Quim. Nova* **2011**, *34*, 1136. [Crossref]

51. Khalil, H. E.; Kamel, M. S.; *J. Pharm. Sci. Res.* **2015**, *7*, 509. [Link] accessed in April 2025
52. Pinheiro, A. A. V.: *Contribuição para o Conhecimento Fitoquímico de Sida rhombifolia L. (Malvaceae) e Avaliação da Atividade Antimicrobiana do seu Óleo Essencial*; Dissertação de Mestrado, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, Brasil, 2016. [Link] accessed in May 2025
53. Thien, T. V. N.; Do, L. T. M.; Dang, P. H.; Huynh, N. V.; Dang, H. P.; Nguyen, T. T.; Tran, K. T.; Huu, D. M. N.; That, Q. T.; *Nat. Prod. Res.* **2019**, *35*, 2218. [Crossref]
54. Khan, R. S.; Senthi, M.; Rao, P. C.; Basha, A.; Alvala, M.; Tummuri, D.; Masubuti, H.; Fujimoto, Y.; Begum, A. S.; *Nat. Prod. Res.* **2015**, *29*, 1069. [Crossref]
55. Trachtenberg, A.; Muduli, S.; Sidoryk, K.; Cybulski, M.; Danilenko, M.; *Front. Pharmacol.* **2019**, *10*, 507. [Crossref]
56. Kubo, I.; Nihei, K.; Tsujimoto, K.; *Bioorg. Med. Chem.* **2004**, *12*, 5349. [Crossref]
57. Yuan, S.; Li, W.; Li, Q.; Wang, L.; Cao, J.; Jiang, W.; *J. Agric. Food Chem.* **2019**, *67*, 2801. [Crossref]
58. Musa, N. M.; Sallau, M. S.; Oyewale, A. O.; Ali, T.; *Adv. J. Chem., Sect. A* **2024**, *7*, 1. [Crossref]
59. Oliveira, R. C.; Bandeira, P. N.; Lemos, T. L. G.; Santos, H. S.; Scherf, J. F.; Rocha, J. E.; Pereira, R. L. S.; Freitas, T. S.; Freitas, P. R.; Pereira-Junior, F. N.; Marinho, M. M.; Marinho, E. M.; Marinho, E. S.; Nogueira, C. E. S.; Coutinho, H. D. M.; Teixeira, A. M. R.; *J. Biomol. Struct. Dyn.* **2021**, *40*, 12785. [Crossref]
60. Somova, L. O.; Nadar, A.; Rammanan, P.; Shode, F. O.; *Phytomedicine* **2003**, *10*, 115. [Crossref]
61. Tsai, S. J.; Yin, M.-C.; *J. Food Sci.* **2008**, *73*, 174. [Crossref]
62. Sultana, T.; Rashid, M. A.; Ali, M. A.; Mahmood, S. F.; *Bangladesh J. Sci. Ind. Res.* **2010**, *45*, 27. [Crossref]
63. Shanmugan, M. K.; Dai, X.; Kumar, A. P.; Tan, B. K.; Sethi, G.; Bishayee, A.; *Biochem. Pharmacol.* **2013**, *85*, 1579. [Crossref]
64. Huang, L.; Luo, H.; Li, Q.; Wang, D.; Zhang, J.; Hao, X.; Yang, X.; *Eur. J. Med. Chem.* **2015**, *95*, 64. [Crossref]
65. Navina, R.; Lee, Y. G.; Kim, S. M.; *Curr. Bioact. Compd.* **2017**, *13*, 177. [Crossref]
66. Gerola, A. P.; Santana, A.; França, P. B.; Tsubone, T. M.; de Oliveira, H. P.; Caetano, W.; Kimura, E.; Hioka, N.; *Photochem. Photobiol.* **2011**, *87*, 884. [Crossref]
67. Pauli, G. E. N.; Araruna, F. B.; Eiras, C.; Leite, J. R. S. A.; Chaves, O. S.; Brito Filho, S. G.; de Souza, M. F. V.; Chavero, L. N.; Sartorelli, M. L.; Bechtold, I. H.; *Materials Science and Engineering: C* **2015**, *47*, 339. [Crossref]
68. de Medeiros, F. A.; Medeiros, A. A. N.; Tavares, J. F.; Barbosa Filho, J. M.; Lima, E. O.; da Silva, M. S.; *Quim. Nova* **2012**, *35*, 1179. [Crossref]
69. Falcão-Silva, V. S.; Silva, D. A.; Souza, M. F. V.; Siqueira-Júnior, J. P.; *Phytother. Res.* **2009**, *23*, 1367. [Crossref]
70. Farhadi, F.; Khameneh, B.; Iranshahi, M.; Iranshahy, M.; *Phytother. Res.* **2019**, *33*, 13. [Crossref]
71. Freires, I.; Denny, C.; Benso, B.; de Alencar, S.; Rosalen, P.; *Molecules* **2015**, *20*, 7329. [Crossref]
72. Van Vuuren, S.; Holl, D.; *J. Ethnopharmacol.* **2017**, *208*, 236. [Crossref]


*This is an open-access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License.*