

31. **Dissertação:** “Quassinóides (Revisão Crítica do Conhecimento Estrutural e Biossíntese) e Quimiosistemática de Simaroubaceae”.

**Autor:** Sheila Marino Simão

**Orientador:** Prof.. Raimundo Braz Filho, Dr. Euclides Lameiras Barreiros e Dra Maria de Fátima G. Fernandes da Silva

**Data da Defesa:** 16/05/1986

**Resumo:** Os quassinóides, micromoléculas pelo que se sabe, produzidas exclusivamente por Simaroubaceae representam alto potencial farmacológico, comprovadamente decorrente de peculiaridades conhecidas das características estruturais. Esta tese compreende e apóia-se em extenso levantamento crítico dos dados espectrométricos (RMN  $^1\text{H}$ , E.M. e RMN  $^{13}\text{C}$ ) e das estruturas propostas, publicadas até dezembro de 1984. A partir de tabulação apropriada e de classificação estrutural especialmente elaborada, essas estruturas puderam ser analisadas, não apenas da forma clássica individual, mas, sobretudo pela comparação entre os valores espectrais quassinóides afins, o que permitiu nova interpretação estrutural para os casos de evidente incorreção. Esta sistematização do conhecimento da estrutura dessas micromoléculas tem por objetivo servir de base para um método mais seguro de interpretação, facilmente automatizável. Compreende também o estudo quimiosistemático de Simaroubaceae, por meio de parâmetros do avanço evolutivo ao nível de oxidação molecular ( $\text{Ae}_o$ ) e de especialização do esqueleto ( $\text{AE}_e$ ), possibilitado pela complementação daquele levantamento, abrangendo desta vez também outros metabólitos secundários, e permitindo a conclusão, entre outras, de que pelo menos à luz deste critério o gênero *Harrisoria* não deveria estar incluído nesta família. E finalmente, contém uma revisão pormenorizada e também crítica da biossíntese dos quassinóides, onde se destaque as propostas inéditas de racionalização mecanística de formação dos quassinóides  $\text{C}_{18}$  e do “Ceto-ácido” isolado de *Brucea antidysenterica*.