

Novos derivados da biochanina A, uma isoflavona isolada de espécies de *Andira* (Leguminosae)

Virginia Claudia Silva (PG) e Mário Geraldo de Carvalho* (PQ)

Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, 23851-970, Seropédica, Rio de Janeiro. mgeraldo@ufrj.br

Palavras Chave: *Andira*, isoflavona, biochanina A, derivados iodados.

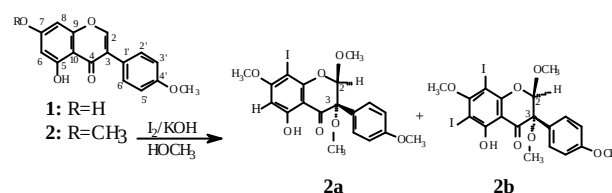
Introdução

As citações sobre propriedades físico-químicas e biológicas de flavonóides¹ têm sido freqüentes na literatura. São sempre utilizadas como exemplo na aplicação das novas metodologias de investigações científicas quanto às propriedades de substâncias naturais¹⁻³. O uso de reações para modificação estrutural ou incorporação de grupos funcionais em estruturas de produtos naturais é um meio de avaliar a possibilidade de melhorar as atividades desses constituintes², além de fornecer informações para elucidação estrutural, conduzir à obtenção de novas substâncias e, inclusive, permitir a avaliação novos dados espectrométricos³. A incorporação de iodo em flavonóides tem sido usada para a obtenção de precursores sintéticos de biflavonóides via reação radicalar⁴. Nesse trabalho descrevemos a mesma reação realizada com um derivado da isoflavona natural conhecida como biochanina A, isolada de espécies de *Andira*⁵, que forneceu dois produtos novos na literatura.

Resultados e Discussão

Inicialmente fez-se a reação de metilação da biochanina A (**1**) através da reação com diazometano para obter a 4,7-dimetoxi-5-hidroxi-isoflavona (**2**). 28 mg de **2** foi dissolvido em metanol (10 mL contendo 25 mg de KOH) e adicionado iodo até coloração castanho claro (8,5 mg). Após agitação durante 3 horas à temperatura ambiente, fez-se a extração e purificação do produto. Fez-se análise dos espectros de IV, RMN¹H e ¹³C (1D e 2D) e espectro de massas do material e identificaram-se dois componentes, *rel*-2*R*,3*S*-2,3,7,4'-tetrametoxi-5-hidroxi-6,8-diiodo-isoflavanona (**2a**) e *rel*-2*R*,3*S*-2,3,7,4'-tetrametoxi-5-hidroxi-8-iodo-isoflavanona (**2b**) (**Esquema 1**). A análise com CG-EM-IE mostrou dois picos [*T_R* 19,0 min (58,14%) e *T_R* 25,3 (41,86%)] cujos espectros de massas apresentaram picos compatíveis com a incorporação de átomo de iodo e duas metoxilas [*m/z*: **2a** 486 (100, C₁₉H₁₉O₇I, M⁺); 456 (40, M-30), 194 (80), 179 (40), 151 (25) e **2b**: 612 (100, C₁₉H₁₈O₇I₂, M⁺), 512 (M-30, 10), 418 (9, RDA), 194 (90), 151 (40); 194= H₃COCH=COCH₃(C₆H₄)OCH₃ via rearranjo RDA]. Além da análise detalhada dos espectros de

massas, os dados dos espectros de RMN ¹H(200 e 500 MHz) e ¹³C (BBD e DEPT, 50,3 MHz e 125 MHz), aliados a experimentos de NOEDIFF (200 MHz) permitiram identificar os dois componentes na mistura de produtos.



Esquema 1. Estruturas da biochanina A (**1**), do derivado (**2**) e reação de obtenção de **2a** e **2b**.

Conclusões

Os produtos dessa reação com isoflavona são diferentes dos de flavonas, porque ocorre a adição de metoxilas na enona. Este é o primeiro trabalho que descreve a incorporação de átomos de iodo em isoflavonas.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq, CAPES, FAPERJ e PADCT/FINEP pelas bolsas e suporte financeiro. Também agradecem a CENAUREMN/UFC pelos espectros obtidos a 500 MHz.

¹Plants Flavonoids in Biology and Medicine. Biochemical, Pharmacological, and Structure-Activity Relationships, V. Cody, E. Middleton Jr., J.B. Harborne Editors., Alan R. Liss Inc., NY; 1986.

²De Carvalho, M. G.; Velandia, J. R.; de Oliveira, J. C. C.; Echevarria, A.; Braz-Filho, R.; Grynberg, N. F. Chemical Structure, Cytotoxic and Antitumour Activities of Biflavonoids from Brazilian *Ouratea* (Ochnaceae). In *Phytochemical and Pharmacology II of the Series "Recent Progress in Medicinal Plants"*, Majumdar, D.K.; Govil, J.N.; Singh, V.K. eds., SCI Tech Publishing LLC: Texas, USA, **2002**, 8, p 77-92.

³De Carvalho, M. G.; Gomes, M. S. da R.; Pereira, A. H. F.; Daniel, J. F. de S.; Schripsema, J. *Magn. Reson. Chem.* **2006**, 44, 35-37.

⁴Ali, S.M.; Ilyas, M. J. *Org. Chem.* **1986**, 51, 5415-5417.

⁵Silva, V. C. da; Alves, A .N .; de; Carvalho, M. G. de; Silva, S. L. da C. de; Sripsema, J. *Química Nova*, 29, 6, 1184-1186, **2006**.