

COMPLETA ATRIBUIÇÃO DE DADOS DE RMN DE ^1H E DE ^{13}C PARA DUAS LIGNANAS ARILNAFTALÊNICAS

Rosângela da Silva^{1*} (PQ), Marcelo Maia Ruas¹ (PG), Márcio L. A. e Silva¹ (PQ), Jairo K. Bastos² (PQ), Paulo Marcos Donate³ (PQ)

rosilva@unifran.br

¹ Núcleo de Pesquisa em Ciências Exatas e Tecnológicas da Universidade de Franca, Avenida Dr Armando Sales de Oliveira, 201, Franca-SP.

² Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Avenida Bandeirantes 3900, Ribeirão Preto- SP

³ Departamento de Química, Faculdade de Filosofia Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Avenida Bandeirantes 3900, Ribeirão Preto- SP

Palavras Chave: Lignano Lactona, Arilnaftalênicas, RMN de ^1H e ^{13}C .

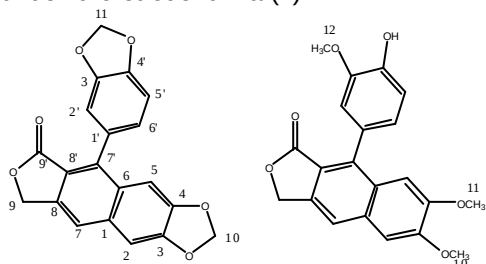
Introdução

Lignanas são produtos naturais que apresentam uma grande diversidade de estruturas químicas e de propriedades biológicas. Dentre as lignanas as arilnaftalênicas desempenham um importante papel devido às propriedades biológicas que apresentam.¹ Apesar de sua importância biológica essa lignanas não são abundantes na natureza, portanto o estudo de suas propriedades biológica deve ser feito a partir de compostos sintéticos. Devido à falta de dados completos de RMN para essa classe de substância descrevemos neste trabalho a completa elucidação estrutural das lignanas taiwanina C (1) e 4metil-dehidroretrodendrina (2) (figura 1) por RMN de ^1H e ^{13}C pelo uso de técnicas como COSY, HMQC e HMBC.

Resultados e Discussão

As lignanas 1 e 2 foram obtidas através de síntese.² Todos os experimentos de 1D RMN (^1H e ^{13}C) foram realizados num espectrômetro Bruker AVANCE DRX400 (400.13 MHz para ^1H e 100.61 MHz para ^{13}C) equipado com um probe de 5 mm (DUL 13C-1).

Figura 1 Estrutura química da taiwanina C(1) e da 4-metil-dehidroretrodendrina (2)



Os experimentos de 2D NMR foram realizados em um espectrômetro Bruker AVANCE DRX500 (500.13 MHz para ^1H e 125.76 MHz para ^{13}C), equipado com um probe inverso de 5 mm (BBI 1H-BB). Os espectros de ^1H foram obtidos com uma janela espectral de 8.28 kHz, com resolução digital de 0.126

Hz. Para os espectros de ^{13}C foi utilizada uma janela espectral de 23.98 kHz com resolução digital de 0.732 Hz.

Tabela 1. Deslocamentos químicos de RMN de ^1H e ^{13}C e multiplicidade dos compostos 1e 2

	Composto 1			Composto 2		
	δC	δH	mult	δC	δH	mult
1	135,9	-	-	133,6	-	-
2	102,9	7,12 (1H)	s	106,4	7,13(1H)	s
3	150,3	-	-	150,44	-	-
4	149,1	-	-	152,22	-	-
5	104,1	7,04 (1H)	s	106,5	7,10(1H)	s
6	130,9	-	-	129,2	-	-
7	119,4	7,61 (1H)	s	118,5	7,60(1H)	s
8	140,2	-	-	140,0	-	-
9	68,3	5,30 (2H)	s	68,4	5,32(2H)	s
10	102,2	6,01 (2H)	s	56,4	3,99(3H)	s
1'	128,7	-	-	126,9	-	-
2'	110,9	6,74 (1H)	d	113,6	6,85(1H)	d
3'	148,0	-	-	146,73	-	-
4'	147,9	-	-	146,01	-	-
5'	108,6	6,89 (1H)	d	114,7	7,01(1H)	d
6'	123,9	6,72 (1H)	d	123,5	6,83(1H)	d
7'	140,5	-	-	140,5	-	-
8'	119,3	-	-	118,7	-	-
9'	170,2	-	-	177,8	-	-
11	101,6	6,02 (2H)	s	56,5	3,83(3H)	s
12	-	-	-	56,1	3,73(3H)	s
OH	-	-	-	-	8,40(1H)	sl

A tabela 1 mostra que, assim como para lignano lactonas com outros esqueletos químicos,^{3,4,5} a natureza do substituinte nos anéis aromáticos afeta pouco os deslocamentos químicos dos carbonos dessas duas estruturas.

Conclusões

A elucidação estrutural dessas duas lignanas fornece dados de RMN ^1H e ^{13}C , ainda não descritos na literatura, com a finalidade de auxiliar a elucidação estrutural de lignanas naturais extraídas de plantas por comparação dos dados obtidos.

Agradecimentos FAPESP e CAPES

¹ Ward, R. S. *Natural Products Report*, **1995**, 44.

² Silva, R a ser submetido à publicação.

³ Silva R, *et al Magn. Reson. Chem.* **2005**, **43**, 966.

⁴ Heleno , V. C. G.; Silva R., *Spectrochimica Acta*, **2006**, 63, 234.

⁵ Silva, R., *et al Magn Reson Chem.* **2004**, 42, 985.