

## Estudo teórico de compostos isolados de plantas do Nordeste do Brasil

Danielle da Costa Silva<sup>1</sup> (IC), Chistiane Mendes Feitosa<sup>2</sup> (PQ), Maria Zeneide Barbosa Bezerra<sup>3</sup>, Maria Teresa Salles Trevisan<sup>3</sup> (PQ), José Machado Moita Neto<sup>2\*</sup> (PQ). \*jmoita@ufpi.br

<sup>1</sup>Núcleo de Pesquisas em Biotecnologia-CEFET-PI. Praça da Liberdade nº 1597, Centro CEP: 64.000-040, Teresina-PI,

<sup>2</sup>Departamento de Química da Universidade Federal do Piauí-UFPI, Campus Ininga CEP: 64049-550, Teresina-PI,

<sup>3</sup>Departamento de Química Orgânica e Inorgânica da Universidade Federal do Ceará-UFC, Campus Pici, CEP: 60542-970, Caixa Postal: 12200, Fortaleza-CE.

Palavras Chave: ChemNMR, deslocamento químico, validação, plantas do Nordeste.

### Introdução

Na Química Orgânica, compostos desconhecidos podem ter sua estrutura elucidada através de técnicas espectroscópicas, tais como: espectroscopia no ultravioleta, no infravermelho, espectro de massas e a ressonância magnética nuclear (RMN).

O trabalho do químico na identificação estrutural dos compostos pode ser minimizado pelo auxílio de softwares que fornece uma proposta de espectro de RMN de <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C para cada substância química a partir do desenho de sua estrutura. Deste modo, o químico pode obter teoricamente o espectro da substância que está propondo e conferir as atribuições dadas para cada deslocamento químico. Neste trabalho avaliamos o ChemNMR, que acompanha o software ChemDraw da CambridgeSoft<sup>1</sup>, partindo de um conjunto de compostos isolados da *Kalanchoe brasiliensis* Camb.(courama), da *Senna siamea* Irwin & Barneby (sena) e do *Anacardium occidentale* L. (caju)<sup>2</sup>, cuja determinação estrutural foi bem estabelecida por RMN de <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C.

### Resultados e Discussão

Os constituintes químicos isolados da *Kalanchoe brasiliensis* foram os seguintes: 8-metóxiquercetina-3-O- $\alpha$ -L-raminopiranosil-7-O- $\alpha$ -L-raminopiranosídeo (KB2), 8-metóxicanferol-3-O- $\alpha$ -L-raminosídeo-7-O- $\alpha$ -L-raminopiranosídeo (KB3),  $\beta$ -sitosterol (KB5), 3', 4', 5, 7-tetrahidroxi-8-metoxiflavona-3-O- $\alpha$ -L-raminopiranosídeo (KB4), glicosídeo do  $\beta$ -sitosterol (KB6), 8-metóxiquercetina (KB7) e 8-metóxiquercetina-7-O- $\alpha$ -L-raminopiranosídeo (KB8). Da *Senna siamea* foram isolados: lupeol (SS10), 1,8-dihidroxi-3-metil-antraquinona (SS9), 1,1',6,8,8'-pentahidroxi-3,3'-dimetil[2,2'-biantraceno]9,9',10,10'-tetrone (SS11) e 1,1',6,6',8,8'-hexahidroxi-3,3'-dimetil [2,2'biantraceno]-9,9',10,10'-tetrone (SS12) e do *Anacardium occidentale* foram isolados o ácido anacárdico dieno (AA2-13) e ácido anacárdico monoeno (AA3-14)<sup>2</sup>.

Utilizando o teste t pareado, constatou-se a não existência de diferença significativa para RMN de <sup>13</sup>C em 11 das substâncias estudadas (KB2, KB3, KB5, KB6, KB7, KB8, SS9, SS10, SS11, AA2-13 e

AA3-14). Para a RMN de <sup>1</sup>H, houve predição estatisticamente correta de 8 dos compostos estudados (KB2, KB3, KB8, SS10, SS11, SS12, AA2-13 e AA3-14).

Para a RMN de <sup>1</sup>H das moléculas KB4, KB5, KB6, KB7 e SS9, assim como para a RMN de <sup>13</sup>C do composto SS12, constataram-se a existência de diferença significativa, no nível de confiança de 95%, entre os valores estimados e experimentais. A pior performance da previsão de RMN de <sup>1</sup>H em relação <sup>13</sup>C está ligada à dificuldade do software prevê a interferência de diferentes solventes utilizados na RMN de <sup>1</sup>H experimental.

A construção de retas de regressão entre valores teóricos e experimentais evidenciou a discordância na previsão dos deslocamentos químicos para RMN de <sup>1</sup>H para dois esteróides (KB5 e KB6). Para os demais compostos, os coeficientes angulares (valor de b) ficaram muito próximos de 1.

### Conclusões

O software ChemNMR nos permitiu comparar os deslocamentos químicos de <sup>13</sup>C e <sup>1</sup>H teórico e experimental dos compostos isolados de plantas do Nordeste do Brasil, através de tratamento estatístico do tipo teste t pareado e regressão linear.

O uso do ChemNMR para a estimativa de RMN de <sup>13</sup>C para estes constituintes mostrou-se adequado para 92% dos compostos estudados.

A performance para a estimativa de RMN de <sup>1</sup>H foi bem menor, apresentando claro problema na estimativa do deslocamento químico de esteróides.

### Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq pelo auxílio financeiro concedido (Processo: 470341/2004-1) e ao programa de Desenvolvimento Científico Regional (DCR FAPEPI/CNPq), pela bolsa concedida a Chistiane Mendes Feitosa.

<sup>1</sup> Software ChemOffice Ultra 2005. CambridgeSoft Corporation. Serial Number: 011-428542-6173.

<sup>2</sup> Feitosa, C. M. Tese (Doutorado) em Química Orgânica. Universidade Federal do Ceará – UFC, Fortaleza, 2005.