

## ISOLAMENTO E IDENTIFICAÇÃO DOS COMPONENTES COM ATIVIDADE ANTICANCER INVITRO DE FRAÇÕES OBTIDOS DA *Kielmeyera coriacea* L. (Guttiferae)

Mary A. Foglio (PQ)<sup>1,2</sup>, Maria C.B.L. de Oliveira (PG)<sup>1,2</sup>, Rodney A. F. Rodrigues (PQ)<sup>1</sup>, Ilza M. O. Sousa (TC)<sup>1</sup>, Elaine Cabral (PG)<sup>3</sup>, Marcos N. Eberlin (PQ)<sup>3</sup>, João E. de Carvalho (PQ)<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Centro Pluridisciplinar de Pesquisas Químicas, Biológicas e Agrícolas, Universidade Estadual de Campinas, <sup>2</sup>Instituto de Biologia, Universidade Estadual de Campinas, <sup>3</sup> Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas  
\*foglioma@cpqba.unicamp.br

Palavras Chave: atividade anticancer, atividade antiproliferativa, *Kielmeyera coriacea*, terpeno, triterpenos pentacíclicos

### Introdução

A *Kielmeyera coriacea* L. (Guttiferae), popularmente é conhecida como Pau-Santo ou Saco-de-Boi. Este trabalho teve como objetivos isolar e identificar os componentes majoritários da fração que previamente demonstrou atividade antitumoral em modelo "in vitro" de cultura de células tumorais humanas apresentado na 30<sup>o</sup> Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2007, o trabalho intitulado "Avaliação da atividade antiproliferativa de extratos e frações obtidos da *Kielmeyera coriacea*."

### Resultados e Discussão

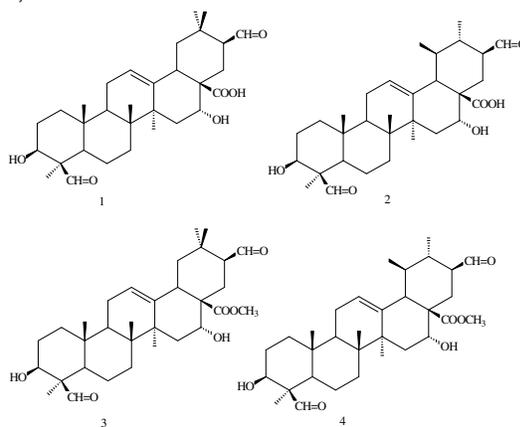
O extrato bruto de clorofórmio impregnado em sílica-gel foi submetido a uma cromatografia de coluna filtrante utilizando-se como eluente hexano e misturas de acetato de etila em hexano, com gradientes crescentes de polaridade. As frações foram monitoradas por cromatografia de camada delgada e reunidas conforme seus perfis cromatográficos fornecendo sete frações que foram submetidos aos ensaios de atividade antiproliferativa in vitro. A fração denominada sete foi purificada por sucessivas cromatografias de adsorção em coluna de sílica-gel utilizando-se gradientes crescentes de polaridade de misturas de hexano/acetato de etila. Obteve-se uma fração denominada fração  $\beta$ , que analisada por cromatografia de camada delgada (CCD) na mistura de CHCl<sub>3</sub>/metanol 5% e revelada com reagente de anisaldeído, após aquecimento, apresentou uma única mancha de coloração violácea. A análise por espectro de massas (Q-ToF Micromass), RMN<sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C, porém, demonstrou tratar-se de uma mistura.

A fração  $\beta$  apresentou no espectro de infravermelho uma banda larga em 3427,7 cm<sup>-1</sup> correspondente ao grupo OH e uma outra em 1659,4 cm<sup>-1</sup> correspondente ao estiramento C=O e outra em 1454 cm<sup>-1</sup> devido ao estiramento C-O do íon carboxílico. Também se observou estiramento C=O em 1711,3 cm<sup>-1</sup> correspondente ao grupo aldeído. A análise por ESI-MS demonstrou íon molecular com m/z 514 e m/z 528 uma.

Através de comparação dos espectros de RMN<sup>1</sup>H, RMN<sup>13</sup>C com dados de modelos de terpenos da literatura (Mahato *et.al.*, 1994, 1997 & Seebacher *et.al.*, 2003) com os dados obtidos experimentalmente sugeriu-se que o composto majoritário contido na fração  $\beta$  tratava-se de uma mistura de triterpenos pentacíclicos de esqueleto oleanico e ursolico.

Segundo dados descritos por Mahato *et.al.* (1994) o esqueleto triterpênico oleanico e ursolico podem ser diferenciados bastando observar os deslocamentos químicos de RMN<sup>13</sup>C dos carbonos olefinicos. Neste caso observa-se um padrão de deslocamentos químicos dos carbonos olefinicos no espectro de RMN<sup>13</sup>C compatíveis com o esqueleto homoanular em C12 – C13 com deslocamentos em  $\delta$  127,1, 125,8, 136,6 e 133,4 ppm respectivamente.

Através da análise dos dados de RMN<sup>13</sup>C no experimento DEPT 90<sup>o</sup> e 135<sup>o</sup> foi possível identificar carbonilas de aldeído, ester e ácido orgânico. Os experimentos de RMN nos experimentos HSQC, HMBC, COSY conjuntamente com os dados do espectro de massas ESI-MS demonstrou tratar-se de uma mistura com componentes majoritários com m/z 514 e 528 que condizem com as estruturas 1, 2, 3, e 4.



FAPESP, CAPES, CNPq

Mahato, S. *et.al.* 1994, *Phytochemistry*, 6: 1517-1575; Mahato, S. *et.al.*, 1997, *Phytochemistry*, 7: 1185-1136; Seebacher, W. *et.al.*, 2003: *Magnetic Resonance in Chemistry*, 41: 636-638