

Investigação do perfil de fragmentação de saponinas de *Cordia leucocephala* por espectrometria de massa com ionização por *electrospray*

Maria da Conceição M. Torres¹ (PG), Ana Isabel V. Maia¹ (PG), Elton L. Lopes¹ (PG), Edilberto R. Silveira¹ (PQ), Francisco Arnaldo Viana² (PQ), Jaécio Carlos Diniz² (PG) e Otilia Deusdênia L. Pessoa^{1*} (PQ). e-mail: opessoa@ufc.br

¹ Departamento de Química Orgânica e Inorgânica, Universidade Federal do Ceará, CP 12.200, Fortaleza-CE, 60.021-970, Brasil. ² Departamento de Química, Universidade do Estado do Rio Grande do Norte, Mossoró – RN, Brasil.

Palavras Chave: Saponinas, IES-EM-EM, fragmentação

Introdução

Saponinas triterpênicas representam uma classe de produtos naturais freqüente em plantas da família Boraginaceae. Estes compostos podem apresentar atividades antiviral, hemolítica, moluscicida, anti-inflamatória, antibacteriana e citotóxica.¹⁻⁴ Uma série de saponinas foi isolada de plantas do gênero *Cordia*.⁵ A importância dessas substâncias seja do ponto de vista farmacológico ou químico, motivou a investigação do padrão de fragmentação das saponinas majoritárias de *Cordia leucocephala*, por espectrometria de massa seqüencial com ionização por *electrospray* (IES-EM), com o objetivo de identificar as saponinas análogas minoritárias. Neste trabalho são apresentados as massas exatas e os principais fragmentos das saponinas **1** - **4** por IES-EM.

Resultados e Discussão

As saponinas foram analisadas em um espectrômetro de massa LCMS-IT-TOF (SHIMADZU) com ionização por *electrospray*, operando em modo positivo. As substâncias foram solubilizadas em MeOH e analisadas por infusão com um fluxo de 10 µL min⁻¹. O estudo de fragmentação foi realizado através de dissociação induzida por colisão (CID) dos íons selecionados, com energia de 50 e 70% do valor normalizado, utilizando argônio como gás de colisão. Os espectros de massas exatas das saponinas apresentaram como pico base o aduto de sódio [M + Na]⁺ (Tabela 1). Os espectros EM² dos íons precursores mostraram padrões de fragmentação semelhantes, exibindo a perda de 1, 2 e 3 unidades de açúcar. A fragmentação da porção glicosídica das saponinas foi observada no EM³ do íon 659 para **1** e **3** e do íon 527 para **2** e **4**.

Tabela 1. Massas exatas dos adutos sódicos de 1-4

Subs.	Fórmula Molecular	Massa [M + Na] ⁺		Erro (ppm)
		calculada	observada	
1	C ₅₃ H ₈₆ NaO ₂₃	1113,5452	1113,5453	+0,09
2	C ₄₈ H ₇₈ NaO ₁₉	981,5030	981,5027	-0,31
3	C ₅₃ H ₈₆ NaO ₂₂	1097,5503	1097,5499	-0,36
4	C ₄₈ H ₇₈ NaO ₁₈	965,5080	965,5072	-0,83

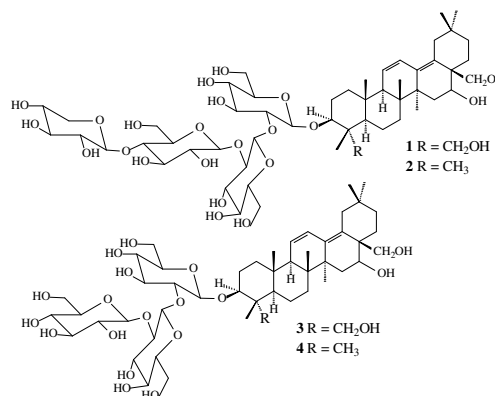


Tabela 2. Fragmentos observados nos espectros EM²

	1	2	3	4
[M+Na] ⁺ - xls	981	-	965	-
[M+Na] ⁺ - glc	-	819	-	803
[M+Na] ⁺ - xls - glc	819	-	803	-
[M+Na] ⁺ - xls - glc - glc	657	-	-	-
[M+Na] ⁺ - aglicona	659	527	659	527

Tabela 3. Fragmentos observados nos espectros EM³

	1	2	3	4
659 - xls	527	-	527	-
527 - H ₂ O	479	479	479	479
527 - glc	365	365	365	365
365 - H ₂ O	347	347	347	347

Conclusões

As substâncias apresentaram um padrão de fragmentação que pode ser utilizado na identificação das demais saponinas presente no extrato EtOH das folhas de *C. leucocephala*, cujas diferenças residem na aglicona (C-23 = CH₃ ou CH₂OH) e no número de unidades de açúcares.

Agradecimentos

CNPq, CAPES, FUNCAP e PRONEX

¹ Theunis, M. H. B. L.; Foubert, K.; Pollier, J.; *et al. Phytochemistry*, **2007**, 68, 2825.

² Yadava, R. N.; Chakravarti, N. *J. Enz. Inh. Med. Chem.* **2008**, 23, 543.

³ Nwokonkwo, D. C. *J. Chem. Soc. Nig.* **2007**, 32, 244.

⁴ Ma, C.; Fan, M.; Lin, L.; *et al. J. Asian Nat. Prod. Res.* **2008**, 10, 177.

⁵ Santos, R. P.; Lemos, T. L. G.; Pessoa, O. D. L.; *et al. J. Braz. Chem. Soc.* **2005**, 16, 662.