

Fragmentação de alcalóides indólicos do tipo ibogano protonados empregando espectrometria de massas *tandem*

Bruno B. Bícago (IC)¹, Nathalya I. de Melo (PG)¹, Ivo J. C. Vieira (PQ)², Elaine R. Figueiredo (PG)², Leda Mathias (PQ)², Raimundo Braz-Filho (PQ)², Antônio E. M. Crotti (PQ)^{1*}

¹Núcleo de Pesquisas em Ciências Exatas e Tecnológicas, Universidade de Franca.

²Laboratório de Ciências Químicas (LCQUI)-CCT, Universidade Estadual do Norte Fluminense Darcy Ribeiro.

*millericrotti@unifran.br

Palavras Chave: alcalóides indólicos, fragmentação, *electrospray*

Introdução

Alcalóides indólicos com esqueleto ibogano apresentam atividades biológicas diversas, tais como antitumoral, antimicrobiana, anti-hipertensiva, estimulante do sistema nervoso central, entre outras¹. O objetivo deste trabalho é determinar o padrão de fragmentação de três alcalóides (**Figura 1**) empregando ionização por *electrospray* e espectrometria de massas *tandem* (ESI-EM/EM), com vistas à obtenção de correlações estrutura-fragmentação que possam ser utilizadas em estudos de dereplicação.

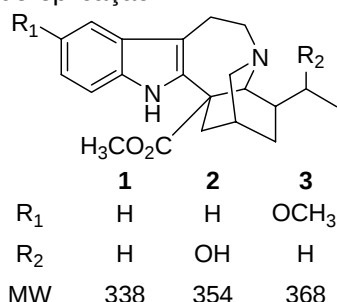


Figura 1. Alcalóides indólicos do tipo ibogano.

Resultados e Discussão

Coronaridina (**1**), (19S)-heyneanina (**2**) e isovoacangina (**3**) foram isolados de *Tabernaemontana salzmanni*, conforme descrito previamente². Os espectros de massas foram obtidos em equipamento UltraTOF-q (Bruker, USA), equipado com fonte de ionização por *electrospray* (ESI). As substâncias foram dissolvidas em MeCN:H₂O (9:1) e infundidas diretamente na fonte de ionização.

Tabela 1. Principais íons dos espectros de ESI-EM/EM dos compostos **1-3** (30 eV)

Íons	1	2	3
A ([M+H] ⁺)	339 (12)	355 (12)	369 (38)
B (A-H ₂ O)	-----	337 (64)	-----
C (n.a.)	196 (33)	196 (12)	226 (15)
D (n.a.)	168 (100)	168 (100)	198 (40)
E (A-C ₁₁ H ₁₆ NO ₂ R)	144 (34)	144 (25)	174 (100)

n.a.: não atribuído.

Os íons **C**, **D** e **E** na substância **3** são 30 unidades de massa maiores que os das substâncias **1** e **2**. A partir desta diferença é possível sugerir que estes

íons são indicativos da presença de um grupo metoxila (R₁=OCH₃) ligado ao anel benzênico. Na Figura 1 está proposta a formação do íon **E**. Por outro lado, o íon **B** ([M+H-H₂O]⁺), que só aparece no espectro de EM/EM da substância **2**, é indicativo da presença da hidroxila na cadeia lateral (R₂=OH).

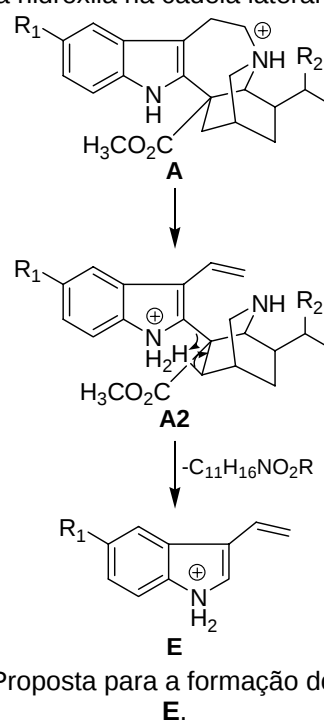


Figura 1. Proposta para a formação do íon produto **E**.

Conclusões

Os resultados obtidos até o momento demonstraram a presença de alguns íons diagnósticos nos espectros de EM/EM que podem ser utilizados para identificar a presença dos grupos R₁ e R₂. Outros alcalóides estão sendo também investigados por nosso grupo de pesquisa.

Agradecimentos

Ao prof. Dr. Norberto P. Lopes (FCFRP/USP), pela concessão do equipamento para a realização dos experimentos e à FAPESP (Proc. 07/54241-8)

¹Bruneton, J. *Pharmacognosy, Phytochemistry, Medicinal Plants*. Intercept Limited - Lavoisier, Andover - UK, 1995, 826.

²Figueiredo, E. R.; Vieira, I. J. C.; Mathias, L.; Braz-Filho, R. 29ª. Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química. CD de resumos, PN-191.