

## Estudo de fragmentação de diterpenos isopimaranos por IES-EM/EM

Helvécio M. Santos Júnior (PQ)<sup>1\*</sup>, Michelle J. C. Rezende (PQ)<sup>1</sup>, Ricardo Vessecchi (PQ)<sup>2</sup>, Norberto P. Lopes (PQ)<sup>2</sup>, Angelo C. Pinto (PQ)<sup>1</sup>, Claudia M. Rezende (PQ)<sup>1</sup>. \*[martinssantosjr@yahoo.com.br](mailto:martinssantosjr@yahoo.com.br)

<sup>1</sup> IQ/UFRJ – Departamento de Química Orgânica, CEP 21.941-909, Rio de Janeiro – RJ.

<sup>2</sup> FCFRP/USP – Departamento de Física e Química, CEP 14.040-903, Ribeirão Preto – SP.

Palavras Chave: Velloziaceae, diterpenos isopimaranos, electrospray.

### Introdução

Diterpenos do tipo isopimarano possuem diversas atividades biológicas descritas, tais como antimicrobiana, citotóxica, antiinflamatória, dentre outras<sup>1</sup>. Buscou-se neste trabalho determinar o padrão de fragmentação de diterpenos isopimaranos (Figura 1) empregando ionização por *electrospray* acoplada à espectrometria de massas *tandem* (IES-EM/EM), com vistas à obtenção de correlações estrutura-fragmentação que possam ser utilizadas na identificação *online* de substâncias por técnicas hífenadas e desreplacação de resultados.

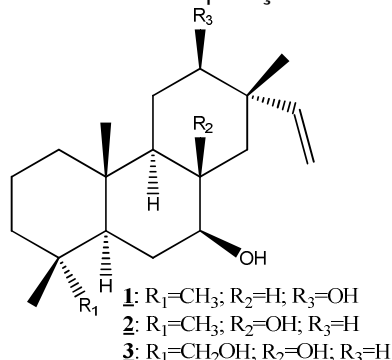


Figura 1. Diterpenos com esqueleto isopimarano.

### Resultados e Discussão

Isopimara-7 $\beta$ ,12 $\beta$ -diidroxí-15-eno **1**, isopimara-7 $\beta$ , 8 $\beta$ -diidroxí-15-eno **2** e isopimara-7 $\beta$ , 8 $\beta$ , 18 $\alpha$ -triidroxí-15-eno **3** (Figura 1) foram previamente isolados de espécies da família Velloziaceae<sup>1</sup>. Os espectros foram obtidos em equipamento UltroTOF-Q (Bruker Daltonics, USA) por infusão direta na fonte de ionização (IES) em modo positivo. Comparação entre os dados de EM/EM das moléculas protonadas (Tabela 1) revelam um íon produto comum de *m/z* 165 (**E**).

Tabela 1. Principais íons dos espectros de IES-EM/EM das substâncias **1**, **2** e **3** (E<sub>lab</sub> = 10 eV)<sup>a</sup>.

Íons	<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>
A ([M+H] <sup>+</sup> )	307 (8)	307 (6)	323 (4)
B (A - H <sub>2</sub> O)	289 (100)	289 (100)	305 (100)
C (B - H <sub>2</sub> O)	271 (15)	271 (40)	287 (15)
D (B - C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> O <sub>2</sub> )	--	--	307 (8)
E (B - R <sub>1</sub> C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> )	165 (11)	165 (31)	165 (20)

<sup>a</sup> Abundâncias relativas entre parênteses.

Tal íon, obtido via eliminação de H<sub>2</sub>O e por reação de retro-Diels-Alder (RDA), é indicativo da presença de hidroxila na posição 7 ou 8 (Figura 2). Os íons **B** e **C**, referentes à eliminação de H<sub>2</sub>O, e o íon **D** na substância **3** servem como diagnósticos em relação aos íons **1** e **2**.

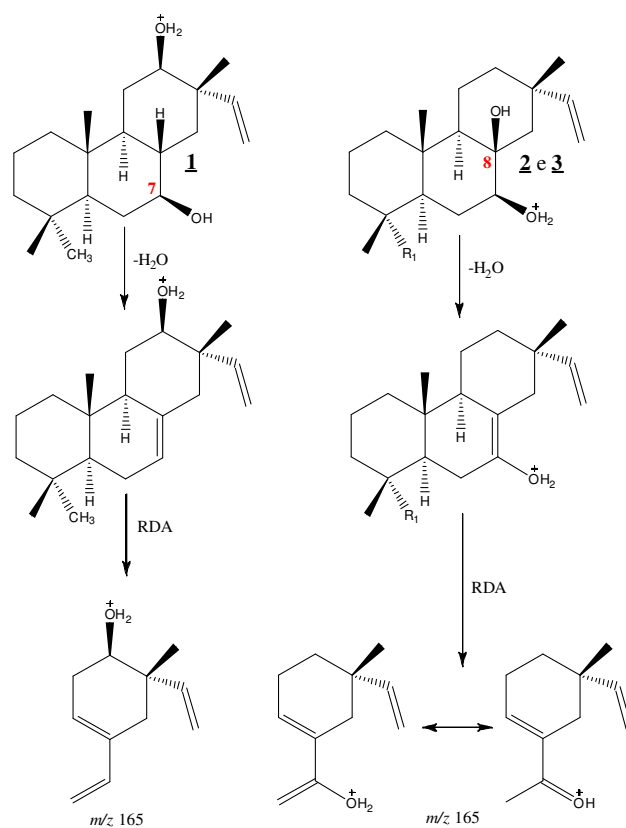


Figura 2. Proposta de fragmentação para o íon E.

### Conclusões

Os resultados obtidos até o presente momento evidenciam a presença de alguns íons diagnósticos que podem ser utilizados para auxiliar na identificação dos grupos R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub> e R<sub>3</sub>. Outros diterpenos isopimaranos estão sendo também investigados por nosso grupo de pesquisa.

### Agradecimentos



<sup>1</sup> Rosa, P. M. Tese de Doutorado. IQ/UFRJ, 2008.