

Determinação Estrutural de Derivados de Benzofenonas de *Mangifera indica* Linn. por Ressonância Magnética Nuclear de ^1H e ^{13}C e EM

Jacqueline do C. Barreto^{1*}(PQ), Maria Teresa S. Trevisan²(PQ), Francisco Thiago Correia de Souza²(IC), Edy de S. Brito³(PQ), Robert W. Owen⁴(PQ), William E. Hull⁵(PQ) jacquelinebarreto@ufcg.edu.br

¹Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Educação e Saúde, Unidade Acadêmica de Educação, Curso de Licenciatura em Química, Sítio Olho D'água da Bica, S/N- 58.175-000, Cuité- Paraíba, ²Departamento de Química Orgânica e Inorgânica, Universidade Federal do Ceará, CP 12200, 60451-970 Fortaleza, Ceará, ³Embrapa Agroindústria Tropical - Planalto do Pici, 60511-110 - Fortaleza, Ceará, ⁴Division of Preventive Oncology, National Tumor Center, Im Neuenheimer Feld 280, D-69120 Heidelberg, Germany, ⁵Department of Spectroscopy, German Cancer Research Center, Im Neuenheimer Feld 280, D-69120 Heidelberg, Germany.

Palavras Chave: *Mangifera indica* Linn., benzofenonas, CLAE-semi-preparativa, RMN

Introdução

Os compostos fenólicos representam um importante papel na química de produtos naturais, pois muitos deles são responsáveis por características inerentes a cada espécie, entre elas, cor e sabor. O consumo regular de substâncias fenólicas ou alimentos e bebidas com alto teor destes compostos têm sido investigado, e é associado a efeitos benéficos à saúde. Vários representantes da classe dos derivados de benzofenonas foram isolados e identificados neste estudo, a partir de extratos metanólicos de várias partes da espécie *Mangifera indica* Linn., entre elas as maclurinas e as iriflofenonas. A biossíntese de agliconas de C-glicosilxantonas, tais como mangiferina e seu isômero isomangiferina, ocorrem a partir de um intermediário benzofenona comum, a maclurina¹. No presente trabalho é apresentada a determinação estrutural por RMN ^1H , ^{13}C e EM, de derivados de maclurina e iriflofenona: 3-C- β -D-glicosídeo de iriflofenona (**1**), 3-C- β -D-glicosídeo de maclurina (**2**) e 3-C-(2'',3''-di-O-galoil)-glicopiranosídeo de maclurina (**3**).

Resultados e Discussão

O composto **1** (35,21 mg, sólido amorfo, MeOH, *m/z* 408, C₁₉H₂₀O₁₀) isolado a partir do extrato metanólico das folhas do cultivar Keit. O espectro de RMN ^1H exibiu sinais aromáticos característicos de sistemas de spins AA'XX' (δ 6,70, d, 8,8 Hz; 7,60, d, 8,8 Hz), os sinais de ^1H e ^{13}C para a posição 1 da porção glicosídica são típicos para C- β -D-glicopiranosídeo ($^3J_{1,2} = 9,8 - 10,0$ Hz; C1 = ~ 76 ppm). Estas observações juntamente com os dados espectrais de ^{13}C sugerem que o composto **1** possui dois anéis aromáticos com um sistema de substituição do tipo catecol e o outro do tipo floroglucinol. Com base nas informações acima descritas e na comparação com dados da literatura³ o composto **1** foi identificado como 3-C- β -D-glicosídeo de iriflofenona. O composto **2** (11,00 mg, sólido amorfo, MeOH, *m/z* 424, C₁₉H₂₀O₁₁) foi isolado a partir do extrato metanólico das folhas do cultivar Embrapa-146 roxa. Os dados espectrais de ^{13}C revelaram um esqueleto semelhante ao do

composto **1**, diferindo apenas no deslocamento químico do C3' e a presença de um sistema de spins assimétricos do tipo ABM para H2', H5' e H6', observado no espectro de ^1H que caracteriza a adição de uma hidroxila ao anel principal. Com base nestes dados e comparação com dados da literatura² o composto **2** foi identificado como 3-C- β -D-glicosídeo de maclurina, que possui uma hidroxila a mais que o composto **1**. A ligação da glicose no C3 da benzofenona é confirmada pelo deslocamento químico de C3 (~ 104 ppm) e vários acoplamentos a longa distância, que foram observados nos espectros de correlação bidimensionais. O composto **3** (7,29 mg, sólido amarelo, amorfo, MeOH, *m/z* 728, C₃₃H₂₈O₁₉), isolado a partir das cascas do fruto do cultivar Amrapali. O espectro de massas de **3** no sugere a presença de duas porções galoila ligadas à glicose. O composto di-O-galoila foi confirmado pela presença de dois sistemas de spins galoila e deslocamento para campo baixo de ambos os hidrogênios glicosídicos Glc-H2 e H3. O assinalamento das posições dos grupos galoila foram obtidos por correlação à longa distância de Glc-H2'' e H3'' ao C7''' dos grupos galoila. Os hidrogênios H2''' e H6''' também mostram correlação à longa distância ao correspondente C7''', o que possibilita o assinalamento posicional. Com bases nas informações acima relacionadas e comparação com dados da literatura² o composto **3** foi identificado como: 3-C-(2'', 3''-di-O-galoil)-glicopiranosídeo de maclurina.

Conclusões

Mangifera indica Linn. é uma importante espécie incluída na dieta alimentar e fonte de substâncias fenólicas com propriedades farmacológicas.

Agradecimentos

Os autores agradecem a Capes, DAAD, CNPq e DKFZ (German Cancer Research Center).

¹Inoue, T.; Fujita, M. *Phytochemistry*, **1981**, 1, 9, 2183-2185.

²Tanaka, T.; Sueyasu, T.; Nonaka, G.; Nishioka, I. *Chem. Pharm. Bull.*, **1984**, 32, 7, 2676-2686.