

ESTUDO QUÍMICO E ATIVIDADES ANTIPROLIFERATIVA, TRIPANOCIDA E LEISHMANICIDA DE *Maxillaria picta*

Thiago L. de Almeida^a, Josiane A. Monteiro^a, Greice K. P. Lopes^a, Lucas U. R. Chiavelli^a, Silvana M. de O. Santin^a, Cleuza C. da Silva^a, Vanessa Kaplum^b, Débora B. Scariot^b, Celso V. Nakamura^b, Ana L. T. G. Ruiz^c, João E. Carvalho^c, Ricardo T. de Faria^d e Armando M. Pomini^{a,*}

^aDepartamento de Química, Universidade Estadual de Maringá, Av. Colombo 5790, 87020-900 Maringá – PR, Brasil

^bDepartamento de Ciências Básicas da Saúde, Universidade Estadual de Maringá, Av. Colombo 5790, 87020-900 Maringá – PR, Brasil

^cCentro Pluridisciplinar de Pesquisas Químicas, Biológicas e Agrícolas, Universidade Estadual de Campinas, Rua Alexandre Cazelatto 999, 13081-970 Paulínia – SP, Brasil

^dDepartamento de Agronomia, Universidade Estadual de Londrina, Rodovia Celso Garcia Cid, PR 445 Km 380, 86055-900 Londrina – PR, Brasil

Foiumbeno B (1):

Aspecto físico: óleo avermelhado. CG-EM 70 eV, m/z (rel. int.): 302 [M]⁺ (100), 256 (35), 255 (60), 227 (90).

RMN ¹³C (75,45 MHz, CD₃OD): δ_c (multiplicidade): 55,6 (q, OCH₃), 61, 6 (q, OCH₃), 61,1 (q, OCH₃), 101,4 (d, C-4), 104,7 (d, C-6), 106,4 (d, C-2), 113,2 (d, C-5'), 122,2 (d, C-6'), 124,0 (d, C-α), 124,1 (s, C-1'), 128,3 (d, C-α'), 141,5 (d, C-1), 142,2 (s, C-3'), 152,1 (s, C-4'), 153,0 (s, C-2'), 159,7 (s, C-3), 162,5 (s, C-5).

RMN ¹H (300,06 MHz, CD₃OD): δ_H (multiplicidade, J em Hz): 3,78 (s), 3,86 (s), 3,87 (s), 6,26 (t; 1,8), 6,56 (m; H-6), 6,57 (m; H-2), 6,63 (d; 8,7; H-5'), 6,90 (d; 16,5; H-α'), 7,24 (d; 16,5; H-α), 7,24 (d; 8,7; H-6).

Foiumbeno C (2):

Aspecto físico: óleo avermelhado. CG-EM 70 eV, m/z (rel. int.): 272 [M]⁺ (100), 241 (78), 240 (96), 212 (40), 197 (55).

RMN ¹³C (75,45 MHz, CD₃OD): δ_c (multiplicidade): 55,7 (q, OCH₃), 61,4 (q, OCH₃), 101,8 (d, C-4), 104,9 (d, C-6), 106,7 (d, C-2), 116,7 (d, C-6'), 118,0 (d, C-4'), 124,1 (d, C-α), 125,5 (d, C-5'), 130,9 (d, C-α'), 132,4 (s, C-1'), 141,1 (s, C-1), 147,0 (s, C-2'), 151,5 (s, C-3'), 159,8 (s, C-3), 162,6 (s, C-5).

RMN ¹H (300,06 MHz, CD₃OD): δ_H (multiplicidade, J em Hz): 3,78 (s), 3,80 (s), 6,30 (t; 2,1; H-4); 6,57 (m; H-6), 6,61 (m; H-2), 6,76 (dd; 8,1; 1,2; H-6'), 6,93 (t; 8,1; H-5'), 7,04 (d; 16,2; H-α'), 7,11 (dd; 8,1; 1,2; H-4'), 7,33 (d; 16,2 Hz; H-α).

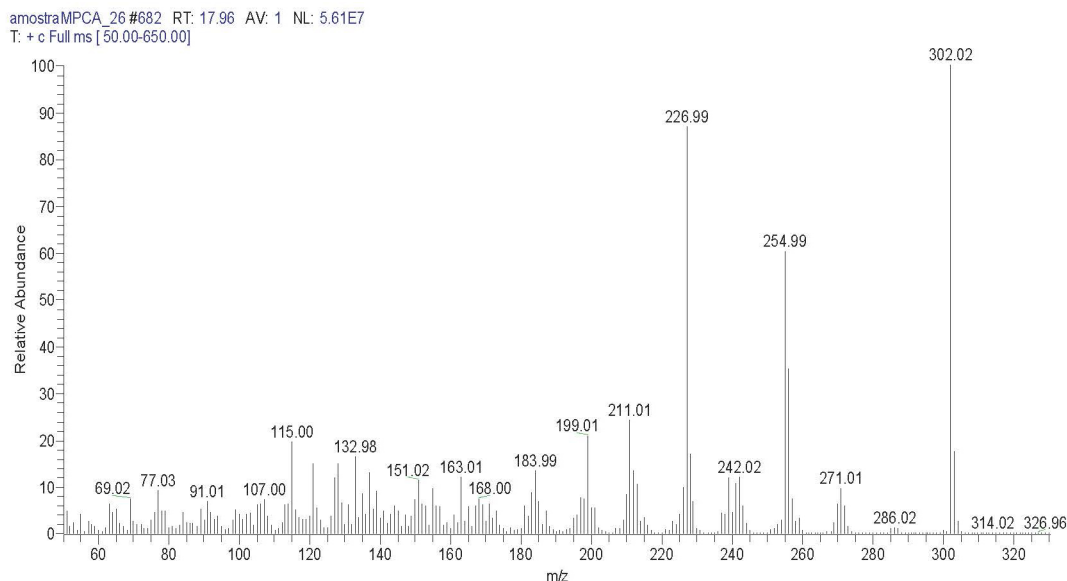


Figura 1S. Espectro de massas de baixa resolução (IE, 70 eV) de 1

amostraMPCA 26 #625 RT: 16.80 AV: 1 NL: 5.97E6
T: + c Full ms [50.00-650.00]

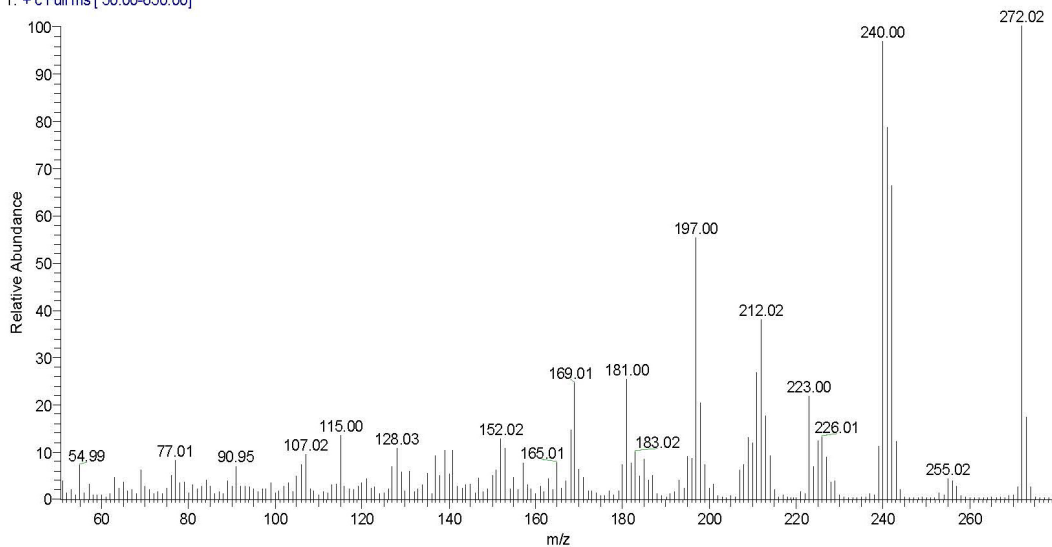


Figura 2S. Espectro de massas de baixa resolução (IE, 70 eV) de 2

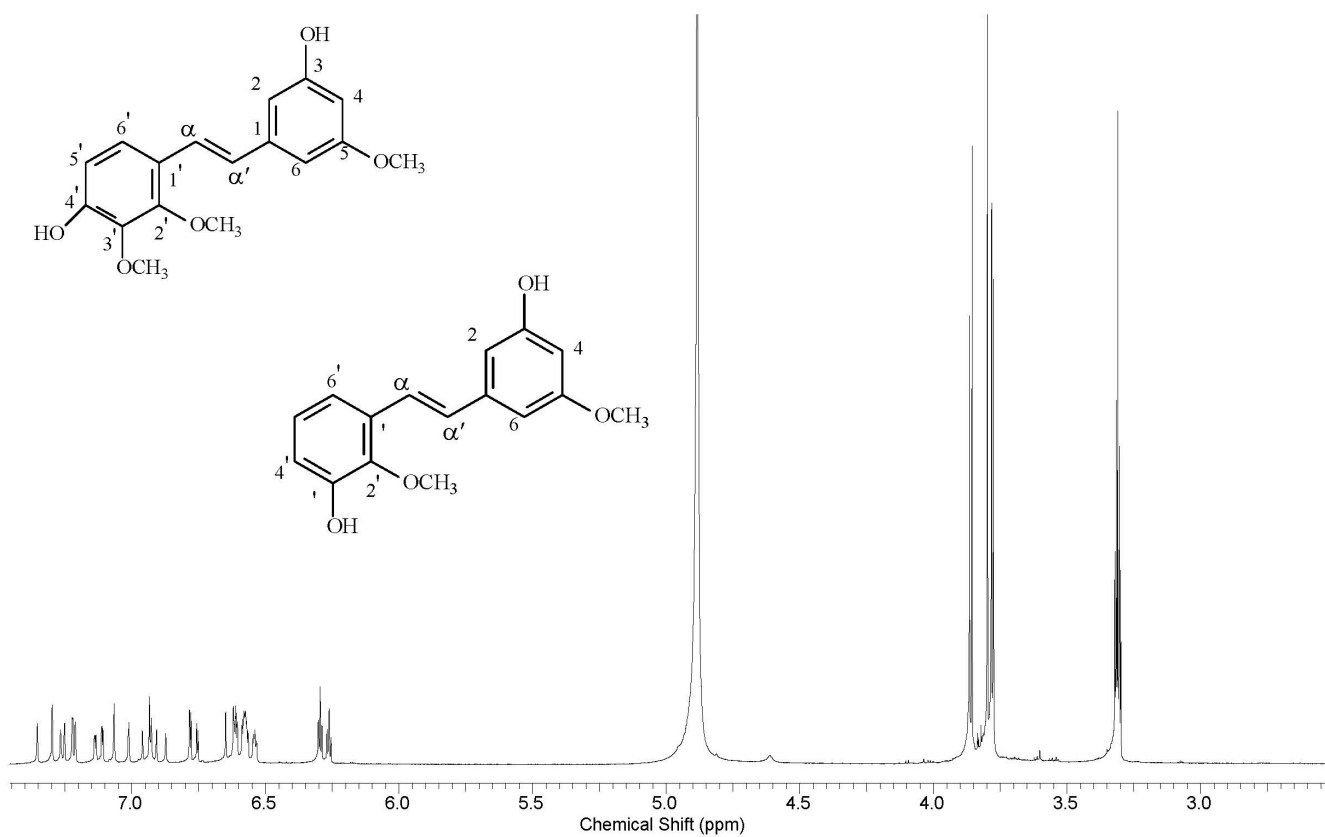


Figura 3S. Espectro de RMN de ^1H (CD_3OD ; 300,06MHz) de 1 e 2

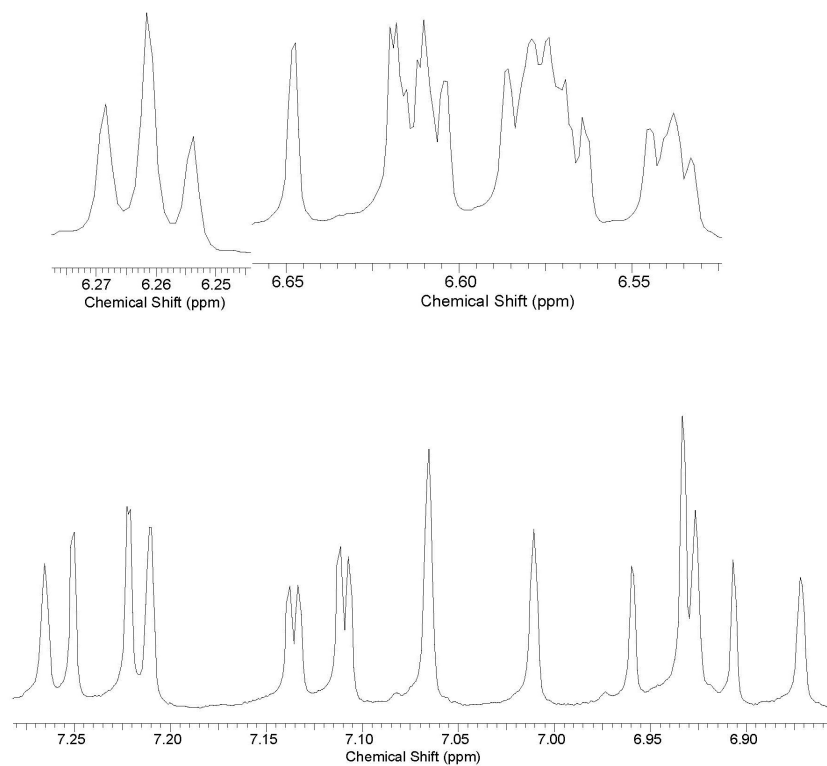


Figura 4S. Expansão dos sinais do espectro de ^1H (CD_3OD ; 300,06MHz) de **1**

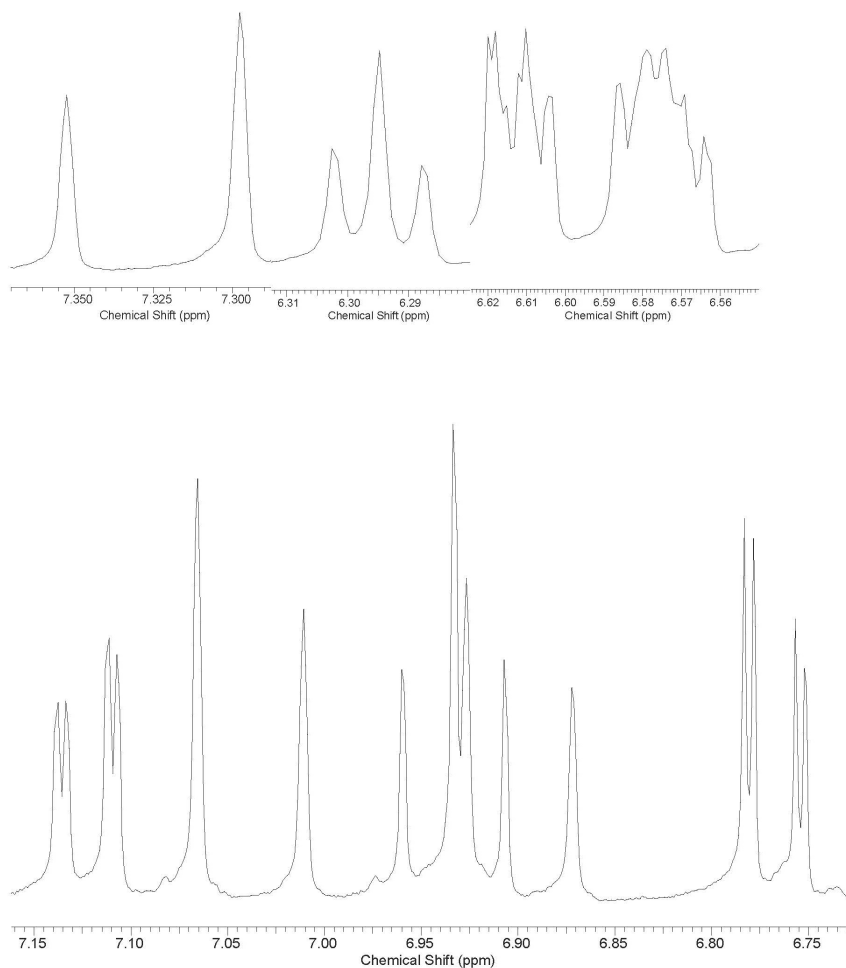


Figura 5S. Expansão dos sinais do espectro de ^1H (CD_3OD ; 300,06MHz) de **2**

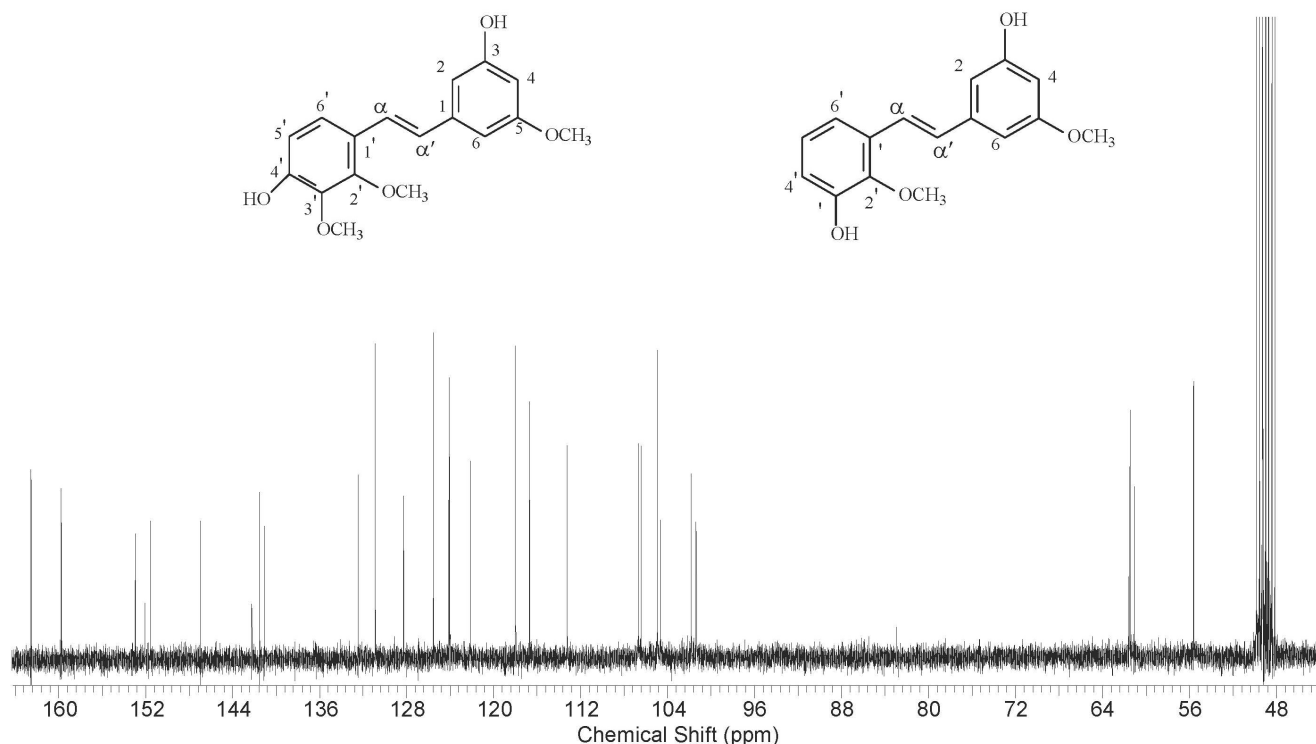


Figura 6S. Espectro de RMN de ^{13}C (CD_3OD ; 75,45MHz) de 1 + 2

Ácido Florético (3):

Aspecto físico: óleo avermelhado. CG/EM (IE 70 eV) m/z: 166 $[\text{M}]^+$ 164 (100), 147 (85), 107 (30), 97 (60), 83 (70).

RMN ^{13}C (75,45 MHz, $\text{CDCl}_3 + \text{CD}_3\text{OD}$): δ_{C} (multiplicidade): 30,8 (t, C-7), 36,8 (t, C-8), 115,8 (d, C-3), 115,8 (d, C-5), 129,8 (d, C-2), 129,8 (d, C-6), 132,4 (s, C-1), 155,9 (s, C-4), 177,2 (s, C-9).

RMN ^1H (300,06 MHz, $\text{CDCl}_3 + \text{CD}_3\text{OD}$): δ_{H} (multiplicidade; J em Hz): 2,56 (t; 7,8; H-8), 2,84 (t; 7,8; H-7), 6,73 (d; 8,4; H-3 e H-5), 7,04 (d; 7,8; H-2 e H-6).

Eburicol (4):

Aspecto físico: Sólido branco. CG-EM 70 eV, m/z (rel. int.): 440 $[\text{M}]^+$ (19), 425 (50), 109 (54), 83 (75), 69 (90), 55 (100).

RMN ^{13}C (75,45 MHz, CDCl_3): δ_{C} (multiplicidade): 15,6 (q, C-30), 16,0 (q, C-18), 18,7 (t, C-6), 18,9 (t, C-21), 19,4 (q, C-19), 21,1 (t, C-11), 22,1 (t, C-27), 22,2 (q, C-26), 24,5 (q, C-28), 26,7 (t, C-7), 28,0 (t, C-2), 28,2 (q, C-29), 28,4 (t, C-16), 31,0 (t, C-15), 31,2 (t, C-12), 31,5 (t, C-23), 34,0 (d, C-25), 35,2 (t, C-22), 35,8 (t, C-1), 36,7 (d, C-20), 37,2 (s, C-10), 39,1 (s, C-4), 44,7 (s, C-13), 50,0 (s, C-14), 50,6 (d, C-17), 50,6 (d, C-5), 79,2 (d, C-3), 106,1 (t, C-31), 134,6 (s, C-8), 134,6 (s, C-9), 157,1 (s, C-24).

RMN ^1H (300,06 MHz, CDCl_3): δ_{H} (multiplicidade; J em Hz): 4,66 (d; 1,2; H-31), 4,71 (s, H-31), 3,24 (dd; 4,8; 11,4; H-3), 2,23 (m; H-25), 1,03 (d; 6,6; H-26), 1,02 (d; 7,2; H-27), 1,00 (s; H-29), 0,98 (s; H-19), 0,92 (d; 6,3; H-21), 0,88 (s; H-28), 0,81 (s; H-30), 0,69 (s, H-18).

Ácido 5-O-cafeiolchiquímico (11):

Aspecto físico: Sólido marrom.

RMN ^{13}C (75,45 MHz, CD_3OD): δ_{C} (multiplicidade): 30,6 (t, C-6), 67,7 (d, C-3), 70,8 (d, C-4), 71,8 (d, C-5), 115,1 (d, C-2'), 115,2 (d, C-8'), 116,5 (d, C-5'), 123,0 (d, C-6'), 127,7 (s, C-1'), 133,6 (s,

C-1), 135,6 (d, C-2), 146,8 (s, C-3'), 147,1 (d, C-7'), 149,6 (s, C-4'), 168,7 (s, C-9'), 168,7 (s, C-7).

RMN ^1H (300,06 MHz, CD_3OD): δ_{H} (multiplicidade; J em Hz): 2,30 (dd; 18,6; 6,0; H-6), 2,90 (dd; 18,6; 6,0; H-6), 3,86 (dd; 8,1; 4,2; H-4), 4,36 (t; 3,6; H-3), 5,23 (m, H-5), 6,27 (d; 15,9; H-8'), 6,71 (m; H-2), 6,77 (d; 8,1; H-5'), 6,94 (dd; 8,1; 2,1; H-6'), 7,04 (d; 2,1; H-2'), 7,55 (d; 15,9; H-7').

Ácido 4-O-cafeiolchiquímico (12):

Aspecto físico: Sólido marrom.

RMN ^{13}C dados espectroscópicos (75,45 MHz, CD_3OD): δ_{C} (multiplicidade): 32,2 (t, C-6), 65,6 (d, C-3), 65,8 (d, C-5), 75,0 (d, C-4), 115,1 (d, C-2'), 115,2 (d, C-8'), 116,5 (d, C-5'), 123,0 (d, C-6'), 127,7 (s, C-1'), 130,5 (s, C-1), 138,0 (d, C-2), 146,8 (s, C-3'), 147,2 (d, C-7'), 149,6 (s, C-4'), 168,9 (s, C-9'), 169,8 (s, C-7).

RMN ^1H (300,06 MHz, CD_3OD): δ_{H} (multiplicidade; J em Hz): 2,30 (m, H-6), 2,75 (m, H-6), 4,20 (dt; 7,2; 5,7 Hz; H-5), 4,61 (t; 3,6; H-3), 5,01 (dd; 7,8; 4,2; H-4), 6,33 (d; 16,2; H-8'), 6,77 (d; 8,1 Hz, H-5'), 6,82 (m, H-2), 6,96 (dd; 8,4; 2,1; H-6'), 7,04 (d; 2,1; H-2'), 7,59 (d; 16,2 Hz, H-7').

Ácido 5-O-cafeiolchiquímico (13):

Aspecto físico: Sólido marrom.

RMN ^{13}C dados espectroscópicos (75,45 MHz, CD_3OD): 39,8 (C-2); 72,3 (C-3); 74,6 (C-4); 72,1 (C-5); 38,2 (C-6); 127,6 (C-1'); 115,0 (C-2'); 146,9 (C-3'); 149,4 (C-4'); 116,3 (C-5'); 122,9 (C-6'); 147,2 (C-7'); 115,2 (C-8'); 168,7 (C-9').

RMN de ^1H (75 MHz, CD_3OD): 1,94-2,25 (m, H-2); 4,16 (dl, 3,0 Hz, H-3); 3,70 (dd, 9,3; 3,0, H-4); 5,36 (ddd, 9,4; 9,4; 4,2, H-5); 1,94-2,25 (m, H-6); 7,03 (d, 2,1, H-2'); 6,76 (d, 8,1, H-5'); 6,93 (dd, 1,8, 8,1, H-6'); 7,55 (d, 16,2, H-7') e 6,27 (d, 16,2, H-8').