

R-13 Atribuição dos Dados de RMN de ^1H e ^{13}C de Dois Derivados da Biochanina A, Isolada de *Andira fraxinifolia* (Leguminosae)

Ana Paula Nunes Siston*, Virginia Claudia da Silva; Mário Geraldo de Carvalho

Programa de Pós-Graduação em Química Orgânica, Dpto de Química, ICE-Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, BR 465 Km. 07, 23890-000-Seropédica-RJ. mgeraldo@ufrj.br e aaocubo@tutopia.com.br.

Palavras-chave: Leguminosae, *Andira fraxinifolia*, biochanina, isoflavona.

A biochanina A (5,7-didroxi-4'-metoxi-isoflavona, **1**) é uma isoflavona abundante em espécies de *Andira* (Leguminosae). Em trabalhos anteriores divulgamos o isolamento e identificação da biochanina A das espécies *Andira anthelmia* (SILVA *et al.*, 2006a) e *Andira fraxinifolia* (SILVA *et al.*, 2006b). A quantidade dessa isoflavona natural tem permitido a preparação de derivados, a realização de análises visando a obtenção de dados espectrométricos, além de podermos utilizá-los para a realização de avaliações biológicas. Metilação: A solução de diazometano foi preparada segundo VOGEL (1986), e adicionada gotas em excesso na substância **1** (30,0 mg) dissolvidas em MeOH. O solvente foi evaporado fornecendo a substância 5-hidroxi-4',7-dimetoxiisoflavona (**1a**, 26,0 mg, P.F. 149-151 $^{\circ}\text{C}$). Acetilação com anidrido acético e piridina: A substância **1** (30,0 mg) foi dissolvida com anidrido acético e piridina (1:1) e permaneceu sob agitação por 48 horas. Após esse período adicionou-se água destilada e após extração com CHCl_3 esta fase orgânica foi lavada com HCl (10%) para retirar o resíduo de piridina. Depois foi seca com sulfato de sódio anidro e, após retirada do solvente em rotavapor sob vácuo, obteve-se a 5,7-acetoxi-4'-metoxiisoflavona (**1b**, 33 mg, P.F. 186-188 $^{\circ}\text{C}$).

A análise dos espectros de RMN ^1H obtidos a 200 MHz permitiu identificar os grupos metoxílicos através de dois singletos em δ_{H} 3,83 e δ_{H} 3,86 ppm sendo um deles sustentado pelo C-4' da substância natural e o outro ligado no C-7 resultante da incorporação de diazometano no fenol da isoflavona natural. No espectro de RMN de ^{13}C (50,3 MHz) totalmente desacoplado observou-se sinais em δ_{CH_3} : 55,1 e 55,6, compatíveis com a formação da metoxila adicional no produto e os dados foram semelhantes aos divulgados na literatura. O produto **1b** foi identificado pela análise dos espectros de RMN de ^1H (200 MHz) e ^{13}C (50,3 MHz). O espectro de RMN ^1H apresentou, além dos sinais dos hidrogênios aromáticos dos anéis A e B da isoflavona, os sinais em δ_{H} 2,32 e δ_{H} 2,40 ppm representando os grupos metilas das unidades de acetato resultantes da acetilação dos fenóis em 5 e 7 (**1** e **1b**). Outra informação da formação desse produto é a ausência da hidroxila quelada HO-5. O espectro de RMN de ^{13}C totalmente desacoplado desse produto apresentou sinais dos carbonos das unidades de acetato (δ_{CH_3} : 21,1, 21,1 e δ_{C} : 168,9 e 170,0) confirmando a formação do produto.

SILVA, V.C.; De CARVALHO, M.G.; SILVA, S.L.C. *Rev. Latinaom. Quím.*, 2006a, Submetido;

SILVA, V.C.; ALVES, A.N.; SANTANA, A.; De CARVALHO, M.G.; SILVA, S.L.C.; SCHRIPSEMA, J. 2006b, *Química Nova*, in press, http://quimicanova.sbq.org.br/QN_OnLine_Geral.htm;

VOGEL, A. I. 1986. *Análise Orgânica Qualitativa*. Química Orgânica. 3ª edição, 1018-1020.