

UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO  
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS  
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA ORGÂNICA

IDENTIFICAÇÃO SISTEMÁTICA DE TRITERPENOS  
PENTACÍCLICOS VIA COMPUTADOR

CLAUDIA MARIA BRANCO DE FREITAS MAIA

SOB A ORIENTAÇÃO DOS PROFESSORES

RAIMUNDO BRAZ FILHO E  
VICENTE DE PAULO EMERENCIANO

Tese submetida como requisito  
parcial para a obtenção do  
grau de mestre em  
Química Orgânica - Fitoquímica

Itaguaí, Rio de Janeiro

Setembro 1988.

TÍTULO DA TESE

IDENTIFICAÇÃO SISTEMÁTICA DE TRITERPENOS  
PENTACÍCLICOS VIA COMPUTADOR.

AUTORA

CLAUDIA MARIA BRANCO DE FREITAS MAIA

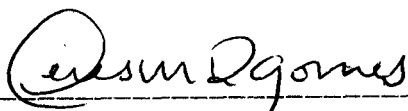
APROVADO EM 16 / SETEMBRO / 1988.

VICENTE DE PAULO EMERENCIANO



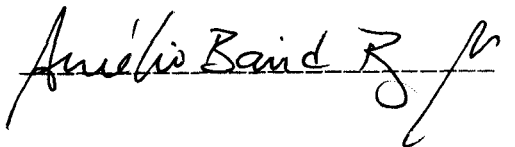
---

CERES MARIA GOMES REZENDE



---

AURÉLIO BUARQUE BAYARD



---

## BIOGRAFIA

Claudia Maria Branco de Freitas Maia, nascida à 20 de maio de 1958, na cidade do Rio de Janeiro. Formada em Engenharia Agrônômica em 1980 pela Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro. Atualmente exerce o cargo de Agrônoma Pesquisadora em empresa particular em Nova Xavantina, Mato Grosso, na área de plantas medicinais, aromáticas e corantes.

Ao Pedrinho,

com amor.

## AGRADECIMENTOS

Aos professores Raimundo Braz Filho e Vicente de Paulo Emerenciano pela orientação e valiosa colaboração para a realização deste trabalho.

A Ceres Maria Gomes Rezende pela amizade e exemplo de perseverança na busca de compreensão do ser humano.

A Leila Vilela Alegrio e José Carlos Netto Ferreira pelo incentivo e amizade.

A José Carlos Warpechowski e Agrotec Engenharia Ltda. (Nova Xavantina-MT), pelo uso do microcomputador.

A CAPES e CNPq

A Jorge Alberto Castilho e Máisa dos Santos Guapyassú pelo carinho e solidariedade.

A minha família, com reconhecimento.

A todos que de alguma forma contribuíram para o desenvolvimento e conclusão deste trabalho.

## SUMÁRIO

I.	Introdução	1
II.	Triterpenos Pentacíclicos	5
III.	Técnicas Usadas na Obtenção de Espectros de RMN de <sup>13</sup> C	10
III.1.	Influência das Técnicas de Obtenção de Espectros na acumulação de dados de RMN <sup>13</sup> C	10
III.2.	Técnicas Usuais	10
III.3.	Técnicas Modernas	11
IV.	Metodologia	15
IV.1.	Organização dos dados	15
IV.2.	Busca de padrões	15
IV.3.	Procedimento de desfuncionalização	16
IV.4.	Algoritmo do programa Triterpe	17
V.	Discussão e Conclusões	24
V.1.	Estratégia de elaboração de sistemas especialistas	24
V.1.1.	A Estratégia de confrontação	24
V.1.2.	A Estratégia de desfuncionalização	26
V.2.	Contribuição das Técnicas descritas em Sistemas Especialistas em determinação estrutural	27
V.3.	Limitações da Metodologia	28
V.3.1.	Integridade dos Bancos de Dados	28
V.3.2.	Limitações Biogenéticas	28
V.3.3.	A Falta de Heurísticas	29
V.4.	Perspectivas	29
VI.	Bibliografia	71
VII.	Anexo 1 - Programa Triterpe	75

## ÍNDICE DE TABELAS E ESTRUTURAS

TABELA	1.1	Deslocamentos químicos de $^{13}\text{C}$ de Triterpenos do tipo Taraxerano	32
TABELA	1.2	Deslocamentos químicos de $^{13}\text{C}$ de Triterpenos do tipo Taraxasterano	34
TABELA	1.3	Deslocamentos químicos de $^{13}\text{C}$ de Triterpenos do tipo Hopano	36
TABELA	1.4	Deslocamentos químicos de $^{13}\text{C}$ de Triterpenos do tipo Lupano	40
TABELA	1.5	Deslocamentos químicos de $^{13}\text{C}$ de Triterpenos do tipo Friedelano	46
TABELA	1.6	Deslocamentos químicos de $^{13}\text{C}$ de Triterpenos do tipo Ursano	54
TABELA	1.7	Deslocamentos químicos de $^{13}\text{C}$ de Triterpenos do tipo Oleanano	63
TABELA	2.	Padrões de multiplicidade de Triterpenos Pentacíclicos.	68
TABELA	3.	Padrões de multiplicidade de Triterpenos Pentacíclicos totalmente desfuncionalizados.	70

## ÍNDICE DE ESQUEMAS E FIGURAS

ESQUEMA	I.	Proposta	mecanística	de	formação	do	esqualeno	6
ESQUEMA	II.	Proposta	mecanística	de	ciclização	do	esqualeno	
FIGURA	I.	Fluxograma	do	programa	TRITERPE			18

## ÍNDICE DE ESTRUTURAS

TRITERPENOS	DA	SÉRIE	TARAXERANO	31
TRITERPENOS	DA	SÉRIE	TARAXASTERANO	33
TRITERPENOS	DA	SÉRIE	HOPANO	35
TRITERPENOS	DA	SÉRIE	LUPANO	38
TRITERPENOS	DA	SÉRIE	FRIEDELANO	43
TRITERPENOS	DA	SÉRIE	URSANO	51
TRITERPENOS	DA	SÉRIE	OLEANANO	58



## R E S U M O

Este trabalho descreve a criação e a implantação em micro-computador de uma metodologia para a identificação de esqueletos de triterpenos pentacíclicos. A metodologia tem como base um procedimento chamado desfuncionalização no qual o espectro de RMN de  $^{13}\text{C}$  de uma substância é analisado e os sinais interpretados como oriundos de carbonos funcionalizados são selecionados. O programa considera então os carbonos responsáveis por estes sinais como se fossem seus correspondentes desfuncionalizados, por exemplo,  $\text{R}_2\text{CO}$  como  $\text{R}_2\text{CH}_2$ ,  $\text{RCO}_2\text{H}$  como  $\text{RCH}_3$ , etc.. É feita uma nova contagem do número de metilas, metilenas, metinas e carbonos quaternários e o número obtido é fornecido para outra subrotina denominada TERPTIPO que sugere um esqueleto provável para a substância. Além dessas funções heurísticas utilizadas, o programa possui também outro módulo de confrontação espectral que permite listar as semelhanças de um espectro de uma amostra com um banco de dados constituído por cerca de 200 espectros de RMN de  $^{13}\text{C}$  de triterpenos pentacíclicos.

## SUMMARY

### COMPUTER ASSISTED IDENTIFICATION OF TRITERPENOID COMPOUNDS

This work describes the creation and implantation of a computational methodology in order to indentify esqueletal types of triperpenes. This methodologh, based on a procedure named "defuncionalization" analyses the  $^{13}\text{C}$  NMR spectrun of a compoud and searches firstly the signals of the carbon atoms carrying functional groups. The program was instructed to count these signal and convert them to the corresponding carbons without functions, by example  $\text{R}_2\text{CO}$  to  $\text{RCH}_2$ ,  $\text{RCO}_2\text{H}$  to  $\text{RCH}_3$ . The program makes a new counting of the sum of the number of  $\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_2$ ,  $\text{CH}$  and  $\text{C}$  carbons and other subroutine named "TERPTIPO" proposes, based on a identification key, a esqueletal type for the compound. The program has other heuristic functions and using other subroutine. It list the similarity index between the spectrum of a sample compound an the data base containg about 200  $^{13}\text{C}$  NMR spectra of triterpenes.

## I. INTRODUÇÃO

Com o advento dos novos métodos físicos de análise de substâncias orgânicas, tentativas para estabelecer regras sistemáticas a fim de elucidar suas estruturas foram igualmente surgindo. A Química de Produtos Naturais e a Síntese Orgânica são áreas de estudos que propiciam sobremaneira o interesse no estabelecimento dessas regras, devido ao grande número e diversidade de novas substâncias.

Simultaneamente, o grande potencial de análise alcançado no campo da informática nas últimas décadas, leva os pesquisadores da atualidade a se interessar cada vez mais por essa disciplina.

A espectroscopia de RMN de  $^{13}\text{C}$  revela-se ideal para o estabelecimento de regras sistemáticas de elucidação estrutural via computador, devido a possibilidade de obtenção de espectros simples (através de técnicas tais como desacoplamento da interação próton-carbono) e com linhas bem definidas, uma para cada carbono na molécula. Além disso, os parâmetros deslocamento químico e multiplicidade de sinais são característicos para cada substância (1) e, em cada substância, característicos para cada carbono, visto que tais parâmetros dependem dos ambientes químico e magnético de cada átomo.

Parece óbvio que, os recursos oferecidos por um computador, quando destinados à finalidade acima citada, servem antes de tudo como um instrumento adicional ao espectroscopista e não para substituí-lo (1 e 2).

Após a aquisição de um espectro ou conjunto de espectros de uma dada substância orgânica pode-se considerar que os problemas de elucidação estrutural envolvem três etapas de trabalho (2):

1. Interpretação de dados espectrais;
2. Criação de propostas estruturais adequadas aos dados espectrais;
3. Avaliação de cada estrutura através de novos experimentos.

Observa-se que a interpretação de dados espectrais (etapa 1) envolve sobretudo o conhecimento oriundo da vivência dos especialistas, difícil de ser codificado e sistematizado, enquanto que a criação de propostas estruturais (etapa 2) está ligada à capacidade de análise combinatória, destacando-se como a melhor etapa para exploração através do uso de computador. Portanto, essa ferramenta de trabalho torna-se útil no desenvolvimento de problemas que representem fases da análise estrutural mais difíceis de realizar manualmente, como a criação exaustiva de alternativas estruturais, a percepção e a manipulação de simetria e estereoquímica moleculares (2).

A avaliação de cada estrutura proposta (etapa 3) pode ser feita inicialmente pelo computador, que pode descartar grande parte de propostas inviáveis fornecidas pelo módulo de criação (etapa 2). A análise final das estruturas restantes cabe ao espectroscopista. Nessa fase, os conhecimentos e a experiência com a análise de dados estruturais tornam-se fundamentais na seleção de estruturas compatíveis, através de modificações químicas na molécula, outros ensaios espectroscópicos, etc..

Após serem acumulados, os dados espectrais de substâncias orgânicas de origem natural, pertencentes a um mesmo grupo biogenético, revelaram a necessidade de sistematizar os diferentes tipos de informações coletadas para facilitar o trabalho de elucidação estrutural.

Os programas de computador para este fim trabalham principalmente com dados de  $^{13}\text{C}$ , E.M. e  $^1\text{H}$ , através de procedimentos classificados em dois módulos:

1. Montagem de estruturas utilizando informações fornecidas pelo químico através da análise de espectros (3);

2. Previsão de espectros para avaliar a confiabilidade de cada estrutura proposta. Neste caso, as estruturas propostas são ordenadas com base em critérios que estabeleçam o quanto cada alternativa estrutural se ajusta aos dados espectrais fornecidos.

Um programa envolvendo as duas vias de trabalho foi desenvolvido recentemente por Gastmans e col. (4) em artigo a ser publicado.

De um modo geral, esses programas necessitam de métodos de codificação estrutural visando adaptar o computador para o trabalho com as estruturas das substâncias orgânicas. O sistema de codificação desenvolvido por Gastmans, Furlan e Emerenciano (5) permite também o estudo de efeitos de grupos substituintes sobre o deslocamento químico em espectros de  $^{13}\text{C}$ , incorporando-se níveis de vizinhança, a análise de substâncias codificadas tridimensionalmente e a previsão dos espectros das substâncias estudadas.

Vale lembrar que, o uso da informática na química orgânica não se restringe à elucidação estrutural. Outras subáreas da química incorporam a aplicação de computadores, podendo-se citar: análise quimiosistemática, estudo das relações entre estrutura molecular e atividade biológica, arquivo bibliográfico, etc.. Portanto, o uso da computação no trabalho científico cada dia mais indispensável, como forma de incrementar a geração, interpretação e sistematização de conhecimentos e a abrangência dos resultados.

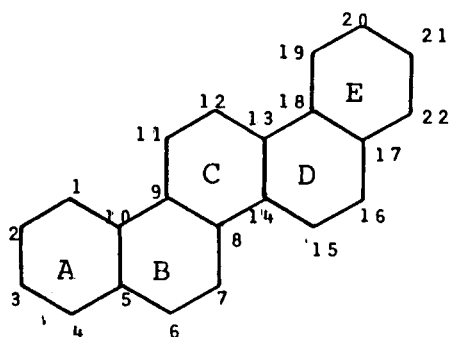
Neste trabalho, procurou-se estabelecer um procedimento computacional de classificação sistemática de triterpenos pentacíclicos, com base nas suas diferentes classes estruturais. Estas classes foram estudadas de acordo com seus padrões de multiplicidade, obtidos por sequências de desfuncionalização (a) pré-estabelecidas de um espectro de RMN de  $^{13}\text{C}$  desconhecido. Após a tentativa de classificação com base no tipo estrutural, o programa elaborado realizou um trabalho de confrontação do espectro da substância desconhecida com cerca de 200 espectros de RMN de  $^{13}\text{C}$  de triterpenos pentacíclicos descritos na literatura. Tais espectros foram armazenados em um banco de dados e, através da confrontação, calcula-se um índice de semelhança (1) entre a substância analisada e as substâncias armazenadas no banco.

(a) No item IV.3 discutiremos o termo desfuncionalização bem como a metodologia do processo.

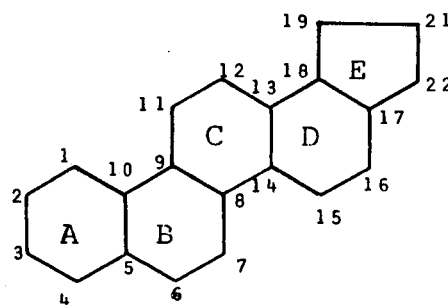
## II. TRITERPENOS PENTACÍCLICOS

Os triterpenos são substâncias orgânicas de origem natural, derivados do ácido mevalônico, com 30 átomos de carbonos, representados por esqueletos básicos contendo quatro (tetracíclicos) ou cinco anéis (pentacíclicos). Modificações metabólicas adicionais podem também produzir a eliminação de átomos de carbono (nor-triterpenos).

Triterpenos pentacíclicos por sua vez, podem apresentar cinco anéis cicloexânicos ou quatro anéis cicloexânicos e um ciclopentânico. Assim, pode-se agrupá-los em dois tipos de esqueletos básicos:



TIPO I

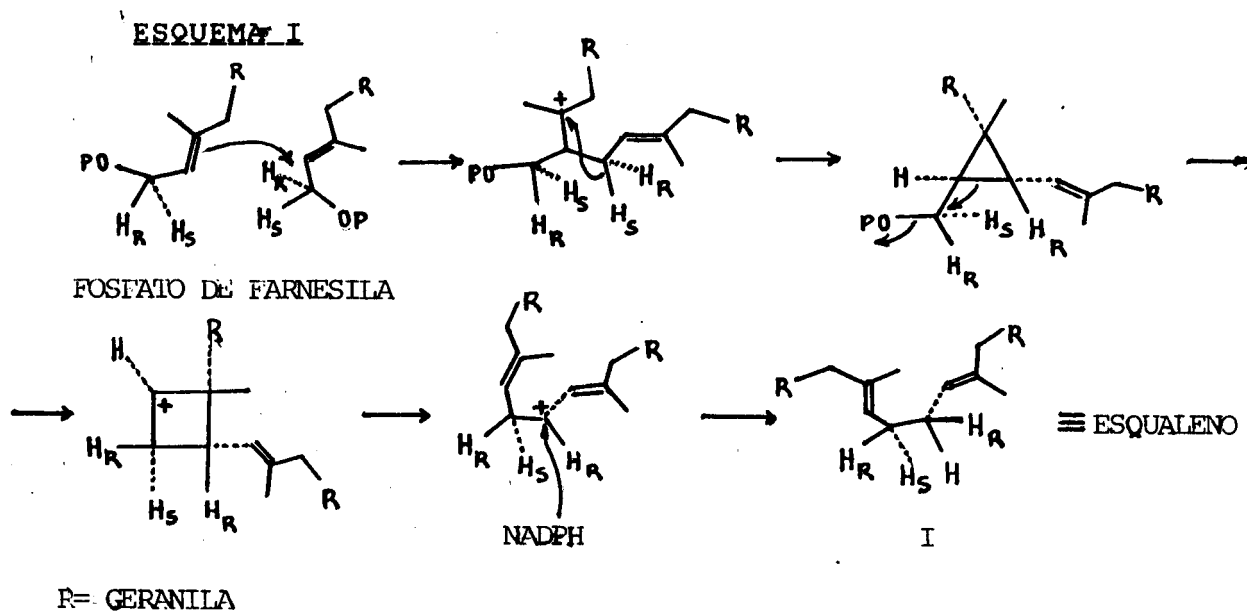


TIPO II

Essas substâncias geralmente possuem a posição 3 sustentando uma função oxigenada, frequentemente uma hidroxila. Caracterizam-se, ainda, pela presença de oito metilas ligadas a átomos de carbono, em junções de anéis ou não, cujas posições variam de acordo com o grupo biogenético. A presença de ligações duplas, endo ou exocíclicas, também é uma característica biogenética.

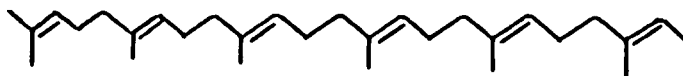
Uma vez que os triterpenos são formados por encadeamento carbônico e formação de anéis cicloexânicos (às vezes ciclopentânicos) surgem muitas possibilidades conformacionais, dependendo da conformação cadeira ou bote que cada anel assume (6,7,8 e 9).

Para melhor compreensão dessas possibilidades conformacionais é preciso entender os mecanismos de biogênese dos triterpenos. O precursor direto de todo triterpeno de origem natural é o esqualeno (I), que por sua vez é formado à partir da reação de isopentenila (II) com fosfato de, -dimetilalila (III), ambos derivados do ácido mevalônico. O produto dessa reação é o fosfato de geranila (IV) que, após a adição de outra unidade de fosfato de, - dimetilalila, produz fosfato de farnesila (6,7 e 8). Finalmente, a reação entre duas unidades fosfato de farnesila fornece o esqualeno, obedecendo a proposta mecanística resumida no Esquema I:

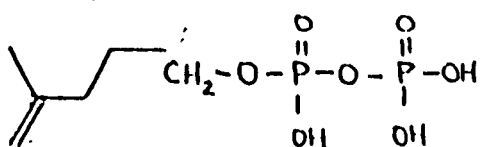
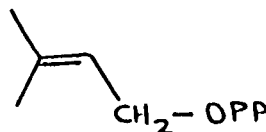




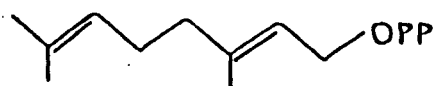
## -Esqualeno (I)



## --Isopentenila (II)

-Fosfato de  $\gamma$ ,  $\delta$  dimetilalila (III)

## -Fosfato de geranila (IV)



O presqualeno, um intermediário com anel ciclopropânico, já foi isolado de fontes naturais (10). A ausência de NADPH no meio reacional (in vitro) provoca o acúmulo de presqualeno. A epoxidação do esqualeno para produzir 2,3-óxido derivado foi observada experimentalmente, aparecendo como provável candidato para iniciar o processo reacional de ciclização. A formação do epóxido é uma reação relativamente comum, promovida por uma epoxidase, NADPH e  $O_2$  (10).

O esqualeno pode então assumir conformações diferentes, controladas pelo molde enzimático. Dessa forma, são conhecidas quatro possibilidades de ciclização que revelam a conformação dos anéis produzidos (11). Essa proposta está representada no Esquema II.

Durante o processo de ciclização pode ocorrer isomerização em centro olefínico. Há menor variação de esqueletos nessa classe de terpenóides do que nos sesqui- e diterpenos. Com algumas exceções, os anéis A, B, C e D são de seis membros e a ciclização é sempre iniciada por uma ligação dupla terminal.

Podem ainda ocorrer modificações secundárias, tais como oxidações, desidrogenações, rearranjos do tipo Wagner-Meerwein envolvendo grupos metilas, etc.. Como foi mencionado, quase todos os triterpenos sustentam um grupo hidroxila ligado ao carbono 3. Duas propostas aparecem como alternativas mecanísticas:

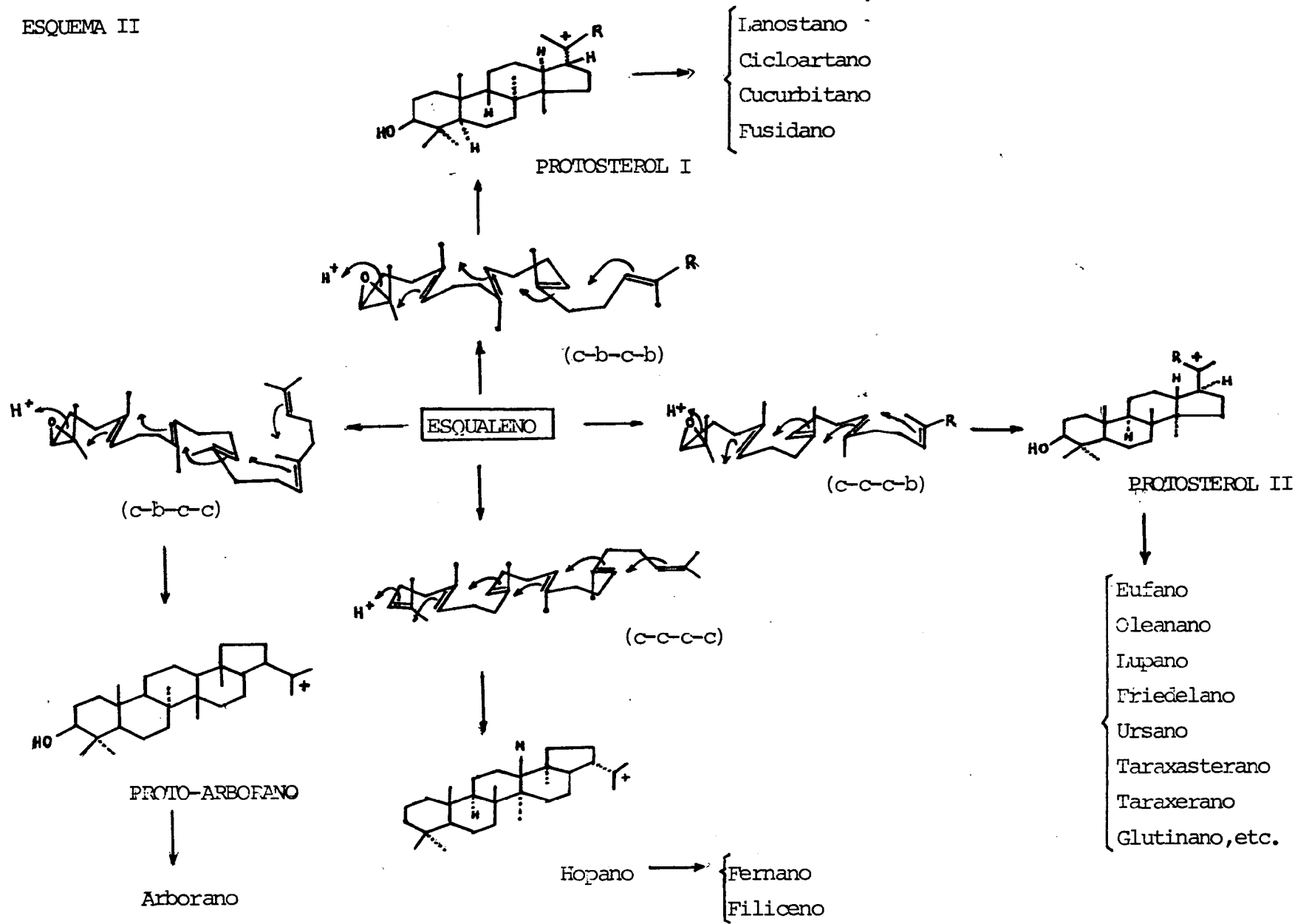
1) Ataque de  $\text{OH}^+$  (íon hidroxônio) ou seu equivalente biológico, responsável pelo desencadeamento do processo de ciclização;

2) Abertura de epóxido catalisada por ácido ( $\text{H}^+$ ), mais favorável mecanisticamente.

A ciclização iniciada por clivagem do epóxido raramente ocorre em terpenos com menor número de átomos de carbono. Em geral, estes são derivados por protonação inicial (o que é raro em triterpenóides) com exceção de fernenos e filicenos isolados de plantas que não incorporam 2,3-óxido de esqualeno (10).

Como pode ser observado no Esquema II, com exceção dos triterpenos derivados do arborano e do hopano, todos os triterpenos pentacíclicos são derivados do esqualeno ciclizado com conformação de anéis c-c-c-b, via o cátion intermediário protosterol II.

ESQUEMA II



### III. TÉCNICAS USADAS EM OBTENÇÃO DE ESPECTROS DE RMN $^{13}\text{C}$

#### III.1. Influência das técnicas de obtenção de espectros na acumulação de dados de RMN de $^{13}\text{C}$

Antes de descrever a metodologia desenvolvida neste trabalho, é importante relatar as influências das técnicas utilizadas na obtenção de espectros de RMN de  $^{13}\text{C}$ , já que constituem a fonte de todo o banco de dados.

Óbvio que o advento das novas técnicas aumentarão o número de espectros disponíveis, sendo que, a confiabilidade dos dados é diretamente proporcional à qualidade destes espectros. A questão da integridade dos bancos será discutida posteriormente.

#### III.2. Técnicas Usuais

1) Obtenção de sinais através de desacoplamento total próton-carbono, eliminando interação spin-spin entre os núcleos  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$ , através de experiências envolvendo irradiação nas frequências de absorção do  $^1\text{H}$ . Nesse caso, espectro apresenta um sinal simples para cada átomo de carbono, fornecendo o deslocamento químico bem definido, sem definição do número de átomos de hidrogênio ligados a cada carbono (multiplicidade).

2) Acoplamento residual próton-carbono. Neste caso, utiliza-se irradiação fora da faixa de absorção do próton (SFORD - Single Frequency Off-Resonance Decoupling) e cada carbono apresenta a

feição de sinal relacionada com o número de prótons que sustenta. Assim, os sinais de grupos metila apresentam-se como quarteto, de metileno como tripleto e de metino como duplete, permanecendo como singleto os átomos de carbono não protonados.

A análise de dados de RMN  $^{13}\text{C}$  com base somente em espectro totalmente desacoplado, oferece maior oportunidade para ocorrer erros na atribuição dos sinais de carbono, pois um sinal de  $\text{CH}_2$  pode ser confundido com um de  $\text{CH}$ , por exemplo. A comparação entre os espectros totalmente desacoplado e com acoplamento residual (Jr) pode afastar dificuldades desta natureza, pelo reconhecimento das feições dos sinais. No caso de triterpenos ( $\text{C}_{30}$ ), especialmente, verifica-se o aparecimento de sinais com deslocamentos químicos próximos, ou superpostos. Esta situação dificulta a interpretação da multiplicidade de sinais.

### III.3. Técnicas Modernas

Nos últimos oito anos, o desenvolvimento da RMN de  $^{13}\text{C}$  tem oferecido contínuo aumento na sensibilidade e na qualidade dos espectros (12). Assim, surgiram novas técnicas, todas caracterizadas por três períodos experimentais (preparação -> evolução -> detecção), ampliando a utilização da espectroscopia de RMN pulsada - Transformada de Fourier, através da escolha adequada de sequência de pulsos e modulação de sinais. As interações spin-spin dos núcleos dos  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$  permitem a utilização de períodos evolutivos (J-modulação). Atualmente, a

aparelhagem moderna permite o uso de técnicas bidimensionais e novas experiências unidimensionais.

As principais técnicas modernas são:

a) APT - Attached Próton Test (SEFT - Spin-Echo-FT). Nesta técnica, a modulação da interação  $^{13}\text{C}$ - $^1\text{H}$  durante o tempo ( $t-1/J\text{CH}$ ), fornece os sinais de  $\text{CH}_3$  e  $\text{CH}$  em fase negativa e os  $\text{CH}_2$  continuam em fase positiva, sendo que o do carbono desprotonado apresenta-se livre de modulação (positivo). Outras sequências de pulso variando-se o valor de  $t$ , relacionado com  $J$ , pode permitir a distinção entre sinais de  $\text{CH}$  e  $\text{CH}_3$  e  $\text{C}$  e  $\text{CH}_2$ .

b) DEPT = Distortionless Enhancement by Polarization Transfer (método aperfeiçoado em relação ao INEPT = Intensitive Nuclei Enhanced by Polarization Transfer). Trata-se de uma técnica em que se obtém aumento da intensidade dos sinais (aumento da sensibilidade do  $^{13}\text{C}$  por transferência de polarização do  $^1\text{H}$ ) e permite a seleção da multiplicidade, podendo-se registrar sub-espectros para  $\text{CH}$ ,  $\text{CH}_2$  e  $\text{CH}_3$  [modulados pela interação spin-spin  $^{13}\text{C}$ - $^1\text{H}_n$  ( $n=1,2$  ou  $3$ )]. Através desta técnica, obtém-se uma análise clara dos multipletos de  $\text{CH}_n$  com a sensibilidade do  $^{13}\text{C}$  aumentada pela transferência de polarização.

c) INADEQUATE - Incredible Natural Abundance Double QUantum Transfer Experiment. Trata-se de uma técnica que utiliza o acoplamento  $^{13}\text{C}$ - $^{13}\text{C}$  (sem enriquecimento da substância com  $^{13}\text{C}$ ) e que permite estabelecer o encadeamento dos carbonos numa molécula. Para facilitar a interpretação destes espectros com acoplamento  $^{13}\text{C}$ - $^{13}\text{C}$ , atualmente prefere-se o registro dos sinais bidimensionalmente. As principais dificuldades operacionais desta

técnica envolvem a baixa probabilidade (0.011%) de ligação  $^{13}\text{C}$ - $^{13}\text{C}$  e a intensidade dos sinais correspondentes  $^{13}\text{C}$ - $^{12}\text{C}$ . Não se pode ignorar o tempo consumido numa experiência deste tipo.

d) HETCOR-2D - HETeronuclear CORrelation 2D. Esta técnica bidimensional permite correlacionar os átomos de  $^{13}\text{C}$  e  $^1\text{H}$  (correlação heteronuclear) que estão ligados entre si e separados por duas ( $^{13}\text{C}$ -C- $^1\text{H}$ ) ou três ligações ( $^{13}\text{C}$ -C-C- $^1\text{H}$ ), através da modulação experimental com  $1\text{JCH}$  (e.g.,  $J = 140$  Hz) e  $2\text{JCH}$ ,  $3\text{JCH}$  (e.g.,  $J = 5-7$  Hz), respectivamente.

c) HOMOCOR-2D - HOMOnuclear CORrelation 2D (COSY = Correlation SpectroscopY). Trata-se de uma técnica de correlação homonuclear que facilita a interpretação da interação spin-spin protônica, mesmo em regiões congestionadas de espectros, onde as experiências seletivas de dupla irradiação tornam-se difíceis ou impossíveis (12, 13, 14).

Por meio destas técnicas é possível eliminar dúvidas na atribuição dos deslocamentos químicos de cada carbono da molécula estudada. A espectroscopia de RMN de  $^{13}\text{C}$  assume portanto, uma dimensão definitiva entre as técnicas usadas na elucidação estrutural.

A importância destas novas técnicas pode ser avaliada através do trabalho de W. F. Reynolds e col. (15). Estes autores descobriram que as atribuições dos deslocamentos químicos de 10 entre 24 átomos de carbonos protonados da molécula do acetato de taraxesterila, foram feitas incorretamente por A. Patra e col. (16), reforçando-se as advertências acima mencionadas. Dessa forma, grande parte dos dados espectrais tabelados pode conter

erros de atribuição, devido aos problemas citados anteriormente. O Sistema de Programação proposto neste trabalho pode então estar sujeito a erros, principalmente na fase de confrontação de espectros.



#### IV. METODOLOGIA

##### IV.1. Organização dos dados

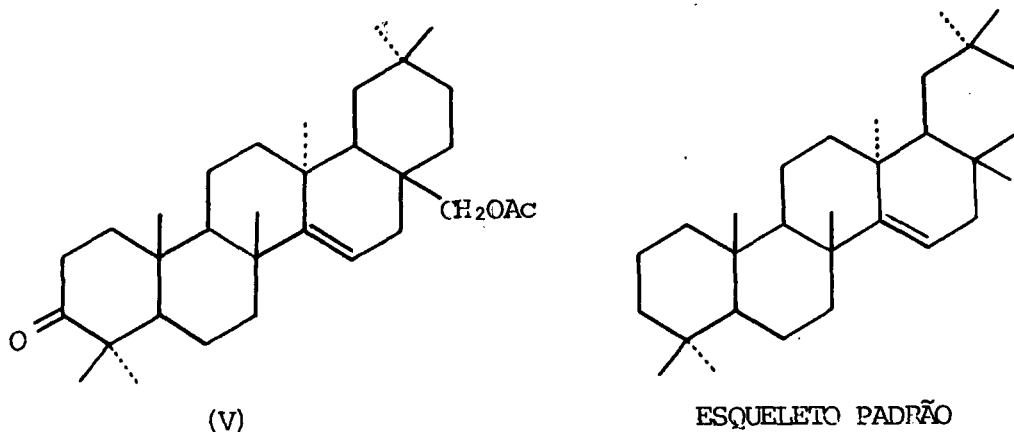
A elaboração de uma metodologia capaz de classificar, via espectros de RMN  $^{13}\text{C}$ , triterpenos pentacíclicos requer primeiramente um levantamento bibliográfico, que foi feito nos principais periódicos especializados na área. Estes dados estão apresentados na Tabela 1.1 a 1.7 (Deslocamentos químicos das substâncias coletadas, TMS como referência interna).

##### IV.2. Busca de Padrões

As tabelas dos deslocamentos químicos de  $^{13}\text{C}$  evidenciaram as regras empíricas que foram adotadas na programação, através do estudo das faixas de deslocamentos químicos características de cada carbono pertencente à molécula de triterpeno de um determinado tipo estrutural. Essas regras procuram também estabelecer os padrões de multiplicidades característicos de cada tipo estrutural. Construiu-se então, a Tabela 2, onde se ilustra 22 tipos de esqueletos-padrões de triterpenos pentacíclicos e seus respectivos códigos. Esta tabela é o ponto de partida do programa como um todo.

## IV.3. Procedimento de "Desfuncionalização"

O termo "desfuncionalização" é usado aqui para caracterizar a retirada dos grupos funcionais de uma substância orgânica quando estes se apresentam em carbonos não funcionalizados no esqueleto padrão considerado. Assim, por exemplo, considerando-se o acetato de 28-hidroxi-D-friedolean-14-en-3-ona (V), um triterpeno do tipo taraxerano, teremos:



- a carbonila em 3 será identificada pelo sinal característico de  $^{13}\text{C}$ , "desfuncionalizada" e interpretada como um  $\text{CH}_2$ ;

- o acetato em 28 será interpretado como um  $\text{CH}_3$ , por sua vez;

- o padrão de multiplicidades de V será então  $\text{C} = 7$ ,  $\text{CH} = 4$ ,  $\text{CH}_2 = 11$  e  $\text{CH}_3 = 8$ , enquadrando-se a substância no tipo taraxerano.

#### IV.4. Algoritmo do Programa Triterpe

O sistema de programação (ANEXO I) denominado TRITERPE, foi desenvolvido em linguagem Fortran 77, utilizável em microcomputadores IBM-PC.

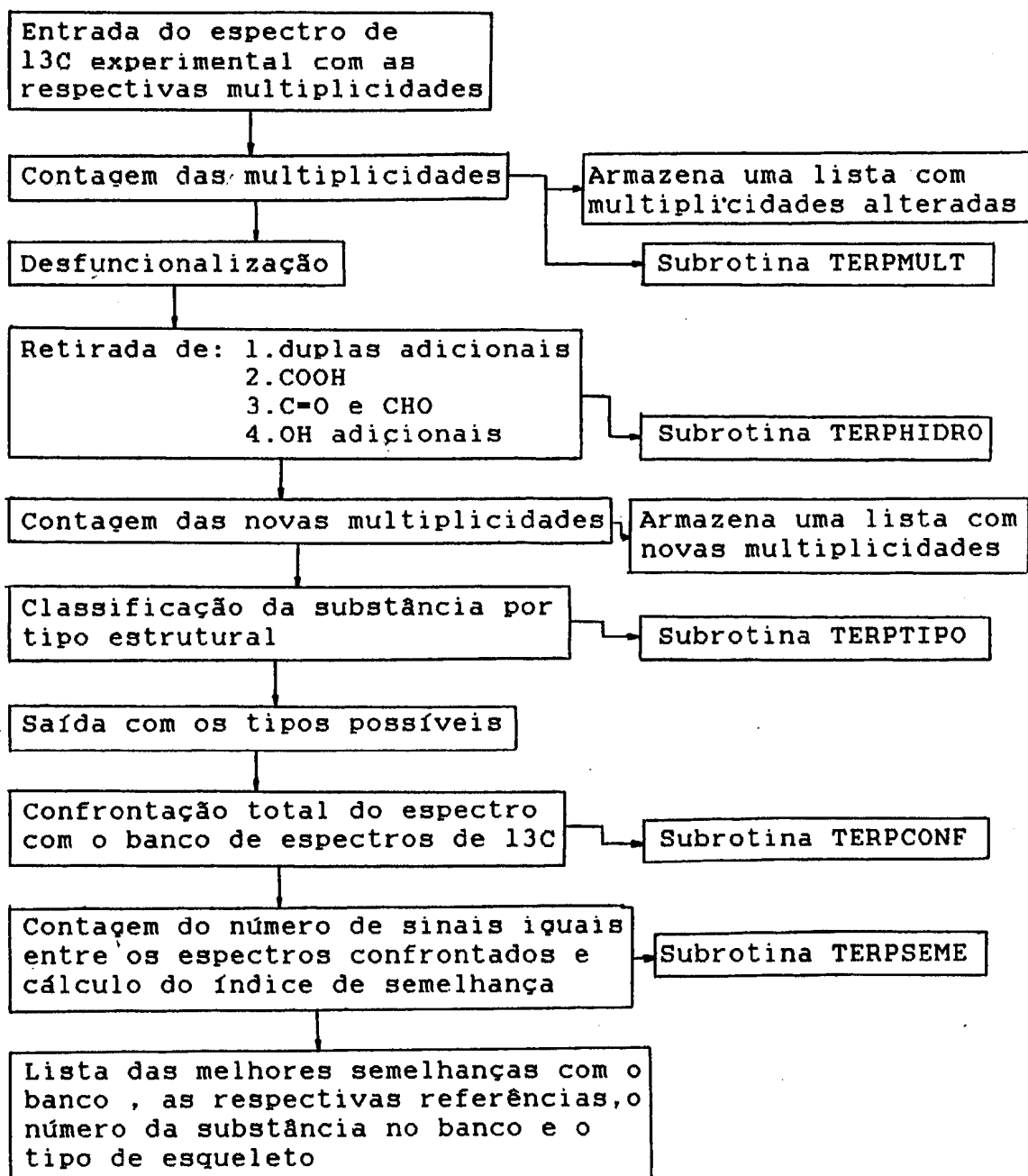
O programa TRITERPE constituído de 5 subrotinas, seguiu o fluxograma representado na Figura I e pode ser dividido em duas etapas:

##### a) CLASSIFICAÇÃO QUANTO AO TIPO ESTRUTURAL

a.1) Subrotina I (TERPEMULT). O sistema recebe os deslocamentos químicos dos átomos de  $^{13}\text{C}$  e as respectivas multiplicidades da substância desconhecida. O sistema conta e guarda uma lista das multiplicidades fornecidas e realiza, a seguir, a desfuncionalização de substituintes extraordinários ao esqueleto padrão. O procedimento de desfuncionalização total não foi adotado devido à grande coincidência de padrões de multiplicidade dos esqueletos totalmente saturados. Esse problema aparece ilustrado na Tabela 3, onde se pode constatar que, somente 4 padrões reúnem os 22 tipos estruturais dos triterpenos estudados. Considerando-se que, cada tipo de esqueleto possui funções ou insaturações típicas, optou-se pelas estruturas parcialmente funcionalizadas.

Assim, o sistema efetua:

FIGURA 1: FLUXOGRAMA DO PROGRAMA TRITERP.



a.1.1) Conversão de C=O cetônica e aldeídica (CHO):

Deslocamentos químicos entre 190.0 a 250.0 ppm foram assumidos como correspondentes a carbonilas cetônicas ou aldeídicas em triterpenos. Se a multiplicidade é igual a 2 (CHO), então o sinal é interpretado e transformado em CH<sub>3</sub> (multiplicidade 4); se a multiplicidade é igual a 1 (C=O), o sinal é transformado em CH<sub>2</sub> (multiplicidade 3).

a.1.2) Conversão de COOH:

Deslocamentos químicos entre 170.0 e 189.0 ppm foram correlacionados com COOH, multiplicidade 1, e transformados em CH<sub>3</sub> (multiplicidade 4).

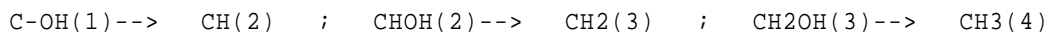
a.1.3) Conversão de ligações duplas (além da típica de cada padrão):

Deslocamentos químicos entre 100.0 e 165.0 ppm foram atribuídos a carbonos sp<sup>2</sup> olefínicos e a presença de sinais de dois picos conduziu à desfuncionalização de maneira que as multiplicidades reais fossem acrescidas de uma unidade.

a.1.4) Subrotina II (TERPEHIDRO): conversão de OH adicionais (além da OH do carbono 3):

Deslocamentos químicos entre 60.0 e 67.0 ppm foram considerados em região duvidosa e obrigou o sistema a investigar se o sinal pertence a um carbono que sustenta OH ou a um CH vizinho a grupo carbonila. Deslocamentos químicos localizados na região de 67.0 até 87.0 ppm foram considerados como

correspondentes a carbonos monoidroxilados. A existência de mais de um deslocamento químico (um corresponde ao C-3) com multiplicidade 2 (CHOH) nesta faixa, conduziu desfuncionalização dos adicionais, para multiplicidade 3 (CH<sub>2</sub>) (mesmo que esse sinal pertença a outro carbono que não C-3, do tipo CHOH, a contagem das multiplicidades leva sempre ao padrão adequado); se a multiplicidade apresenta-se diferente de 2, a feição do sinal aumentou de uma unidade após a desfuncionalização.



Após a execução de operações de desfuncionalização, o sistema considera as novas multiplicidades e estabelece comparação dos valores encontrados com aqueles dos padrões conhecidos, ou seja, os padrões descritos na Tabela 2.

#### a.2) Subrotina III (TERPETIPO) :

A Tabela 2 mostra que, entre os 22 tipos estruturais, apenas 10 apresentam padrões de multiplicidade peculiares. Os tipos 010 e 051, 020 e 061, 021 e 050, 022 e 060, 031 e 041, e 040 e 070 apresentam coincidência de padrões. Nos terceiro (021 e 050) e sexto casos (040 e 070), o tipo estrutural pode ser discriminado pela análise das faixas de deslocamentos químicos dos carbonos envolvidos na ligação dupla. Porém, os demais não podem ser diferenciados com a análise dos dados acima mencionados. Se o padrão de multiplicidade não se ajusta com nenhum tipo

estrutural tabelado, o sistema solicita o procedimento de confrontação de espectros.

b) CONFRONTAÇÃO DE ESPECTROS

b.1) Subrotina 4 (TERPECONF):

Na etapa de confrontação de espectros, o sistema compara os deslocamentos químicos (O) e as multiplicidades (M) do espectro da substância desconhecida (U) com os de uma substância de referência (R) arquivada no banco de dados. Esse procedimento segue os métodos adotados por Bremser e col. (1), reescrito recentemente (4). Considerando-se pequenas modificações conformacionais, efeitos de solvente ou erros experimentais, uma tolerância I (entre 1 e 2 ppm) pode ser aceita. Se os dados com mesma multiplicidade tem um desvio com este intervalo de tolerância (Equação. 1), aceita-se a existência de um sinal "correspondente".

$$|\Delta| = \delta_U - \delta_R \leq \quad (\text{entre 1 e 2 ppm}) \quad \text{Eq. 1}$$

A identidade de multiplicidade é um prerequisite. A similaridade S pode ser então calculada.

b.1.1) Subrotina 5 (TERPESEM):

A similaridade (S) é calculada com base no produto de dois fatores contendo os desvios (D) verificados nos dados correspondentes e a "discordância relativa" (L) do número total de dados (Equações 2 e 3):

$$D = \frac{\sum_{i=1}^F \Delta_i^2}{F \cdot I^2} \quad (1 \geq D \geq 0) \quad \text{Eq. 2}$$

$$L = \left(1 - \frac{F}{U}\right) \left(1 - \frac{F}{R}\right) \quad (1 \geq L \geq 0) \quad \text{Eq. 3}$$

U - número de dados da substância desconhecida

R = número de dados da substância de referência

F - número de dados correspondentes

A escolha de f (fator de peso) regula a influência de D (desvio) e L (discordância relativa) sobre o resultado S (similaridade), sendo D e L variáveis entre 0 e 1. Se D= 1 e L= 1 (total discordância, o resultado de S (Eq. 4) torna-se zero ("similaridade-zero" = So, Eq. 5).

$$S = \frac{1}{1 + fD} \cdot \frac{1}{1 + (2 - f)L} \quad \text{Eq. 4}$$

$$S_0 = \frac{1}{1 + f} \cdot \frac{1}{3 - f} \quad (S \leq S_0 \leq 1) \quad \text{Eq. 5}$$

Assim, a similaridade normalizada (S) pode ser calculada, assumindo valores entre zero (nenhuma semelhança) e 1 (total semelhança) independentemente da escolha do fator f (Eq. 6)

$$S = \frac{S - S_0}{1 - S_0} \quad (0 \leq S \leq 1) \quad \text{Eq. 6}$$

Na prática, similaridades menores que 0.5 não fornecem qualquer ajuda na elucidação estrutural.



Além do programa principal, TRITERPE, foram elaborados três programas auxiliares, acoplados àquele principal:

1) CRIA 1 -> que arquiva os dados espectrais de RMN <sup>13</sup>C em um banco;

2) CLAUDIA -> lista os deslocamentos químicos e suas multiplicidades do banco CRIA 1, em ordem crescente;

3) NOMETRI -> enumera os tipos codificados na Tabela 2 com seus respectivos nomes.

## V. DISCUSSÃO E CONCLUSÕES

### V.1. Estratégias de Elaboração de Sistemas Especialistas

A construção de sistemas especialistas é hoje objetivo de vários grupos de pesquisa (5). Esses sistemas visam a implantação de um sistema computadorizado capaz de orientar o usuário (por exemplo, o químico) na resolução de problemas práticos (análise espectral, prospecção de petróleo, etc..).

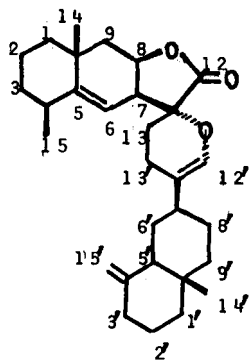
A construção de qualquer desses sistemas envolve a comunicação entre o especialista de uma área específica e outro em computação. O primeiro poderia, em certos casos, deixar arquivado nos sistemas de computador algumas regras adquiridas com a sua experiência e vivência ao longo de anos.

Neste trabalho, algumas idéias oriundas da experiência de alguns pesquisadores em RMN de  $^{13}\text{C}$  de terpenóides foram implantadas em um programa e verificou-se a eficiência deste processo como um método de resolução de problemas (17).

#### V.1.1. A Estratégia de Confrontação

O procedimento descrito no item IV.3.b (CONFRONTAÇÃO DE ESPECTROS) pode ser classificado como uma técnica fraca (não inteligente) de resolução de problemas (17). Esta avaliação decorre do tempo necessário para se encontrar uma solução ótima (um espectro semelhante ao procurado), que aumenta

exponencialmente com o tamanho do banco de dados. Sendo assim, ficaria inviável trabalharmos com grandes coleções de espectros em microcomputadores e o acesso a computadores de grande porte é atualmente ainda demasiadamente caro. De qualquer forma, este problema poderia ser evitado se construíssemos bancos de dados para cada classe em separado (novamente necessitaríamos de um especialista para nos indicar qual o banco a ser utilizado). É importante ressaltar aqui que, o sistema destina-se a químicos com conhecimentos de espectrometria, mesmo um não especialista em terpenóides. A relativa simplicidade do sistema adotado permite a utilização por um leigo no assunto. Por exemplo, a substância abaixo



apresenta 30 sinais no espectro de RMN de  $^{13}\text{C}$  e não pertence à classe dos terpenóides (18). A simples confrontação deste espectro com o banco de dados composto por triterpenóides deixa claro, devido aos baixíssimos índices de semelhança, que esse espectro não poderia ser de um triterpeno. Resultado análogo seria obtido com um esteróide ( $\text{C}_{27}$  geralmente) ligado a um grupamento glicosídico ( $\text{C}_{27} + x$ ).

### V.1.2. A Estratégia de Desfuncionalização

No ítem anterior revelou-se as dificuldades inerentes ao procedimento simplesmente matemático, no qual não existem pistas ou caminhos através dos quais soluções intermediárias podem ser tentadas antes de se verificar uma solução final. Estas pistas são conhecidas em linguagem computacional como heurísticas. A heurística é uma técnica que melhora a eficiência de um processo de busca ao sacrificar idéias de perfeição.

Durante anos, alguns especialistas acumularam conhecimentos sobre interpretação de espectros de RMN de  $^{13}\text{C}$ , cuja viabilidade de serem colocados em um programa de computador (sistemizados) foi testada com sucesso neste trabalho.

O fato de que alguns esqueletos de triterpenóides podem ser identificados somente com a contagem do número de carbonos metílicos, metilênicos, metínicos e quartenários, era conhecido por diversos pesquisadores independentemente, demonstrando a validade deste tipo de enfoque em análise espectral de RMN de  $^{13}\text{C}$  de substâncias alifáticas.

A contagem do número dos tipos de carbono é feita para cada esqueleto, o que envolve, no caso do especialista, um esforço mental entre a análise espectral para a interpretação de um sinal (por exemplo, devido à uma carbonila cetônica) e o tratamento deste sinal como se fosse devido a um  $\text{CH}_2$ . Este processo passa necessariamente por várias contagens até o estabelecimento de um número confiável e a comparação com o número dos tipos de carbono de um determinado tipo de esqueleto. Demonstramos neste trabalho

que, esta metodologia, que nada mais é do que o uso de uma sequência de regras heurísticas, pode ser implantado em sistemas computadorizados.

## V.2. Contribuição das Técnicas Descritas em Sistemas Especialistas em Determinação Estrutural

Alguns sistemas computadorizados de determinação estrutural de substâncias orgânicas são baseados em uma análise espectral minuciosa (espectros de alta resolução) e subsequente fornecimento de fragmentos químicos a um módulo de montagem, que cria inúmeras propostas estruturais para uma futura fase de teste das melhores propostas (2). Uma falha observada nesses sistemas envolve a necessidade do usuário fornecer uma grande "restrição" para o sistema. Caso contrário, o número de propostas estruturais criadas tornaria-o inviável. Estas restrições envolvem informações sobre os esqueletos básicos prováveis.

Neste trabalho obteve-se um método computacional que permite, para o caso dos triterpenos, uma solução automática desses problemas, tornando, assim, a metodologia cada vez mais independente da participação do especialista.

### V.3. Limitações da Metodologia

#### V.3.1. Integridade dos Bancos de Dados

O problema de qualquer tipo de metodologia baseado em bancos de dados decorre da confiabilidade das informações coletadas de trabalhos com atribuições errôneas (15). Este problema pode ser minimizado através de técnicas de depuração dos sinais antes da colocação dos mesmos (Sistema Check, 19) no banco de dados. Outra forma de aumentar a confiabilidade no banco baseia-se na utilização inicial de dados oriundos de trabalhos onde utilizou-se técnicas mais refinadas de determinação estrutural. Todos os dados subsequentes referentes à uma determinada classe de substâncias seriam confrontados com os dados iniciais tomados como modelos.

#### V.3.2. Limitações Biogenéticas

No caso do procedimento de desfuncionalização, um novo esqueleto não seria enquadrado na chave de classificação e o programa não forneceria uma resposta satisfatória. É importante notar, contudo, que um novo esqueleto seria um problema espectral de resolução difícil também para o especialista. Neste caso, o não enquadramento dos dados espectrais já auxilia o químico, que passa então a buscar outras soluções.

### V.3.3. A Falta de Heurísticas

O sistema de desfuncionalização é fundamentado no conhecimento prévio do químico e nem sempre existe um especialista para cada classe de produtos naturais. Embora isso seja uma limitação, abre perspectivas para a criação de outros sistemas, cujas finalidades seriam as de procurar suas próprias heurísticas (Sistema Pick-up, 20).

### V.4. Perspectivas

O sistema de programação desenvolvido durante a realização deste trabalho veio novamente demonstrar a utilidade da linguagem Fortran 77 como bom método de programação estruturada aplicável a projetos de Inteligência Artificial. Este tipo de programação permite o acréscimo de novas regras, caso seja necessário, sem prejuízo das bases de dados preexistentes.

O uso conjunto de duas técnicas de resolução de problemas, a primeira uma simples busca sequencial e a segunda uma abordagem especialista, comprova a eficiência do encadeamento de várias técnicas para resolução de problemas complexos.

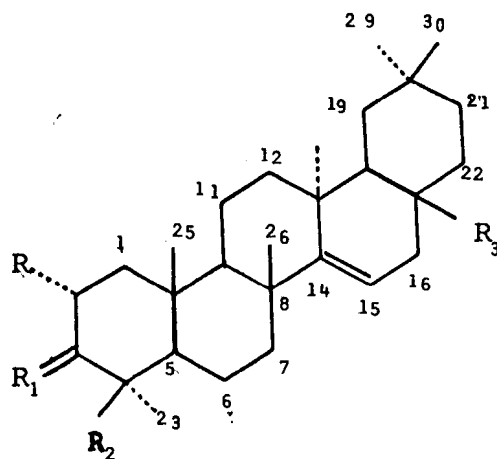
Desde que tenhamos um levantamento bibliográfico completo e que a classe de substâncias seja relativamente estudada, informações botânicas poderiam também funcionar como indicadoras de certos esqueletos.

Apesar da abordagem ter sido baseada somente em dados de  $^{13}\text{C}$ , torna-se óbvio que outras técnicas espectrométricas poderiam ser sistematizadas e utilizadas em conjunto.

Este trabalho é pioneiro no sentido de demonstrar mais uma ferramenta utilizável em tarefas complexas como determinação estrutural. A filosofia do trabalho realizado permite criar novas condições através das quais o químico orgânico, com algum conhecimento em métodos físicos de análise, passa a contar. Esperamos que abordagens similares possam ser utilizadas dentro deste universo ilimitado da Química Orgânica de Produtos Naturais. Este trabalho pode também servir de modelo para novos enfoques ou para a conscientização de que esta disciplina, em vários de seus aspectos, precisa passar por um processo de informatização.



TRITERPENOS DA SÉRIE TARAXERANO



SUBSTÂNCIA	R	R1	R2	R3	REF.
1	H	$\beta$ -OH, $\alpha$ -H	CH3	CH3	21
2	H	$\beta$ -OAc, $\alpha$ -H	CH3	CH3	22
3	H	O	CH3	CH3	21
4	H	$\beta$ -OAc, $\alpha$ -H	CH2OAc	CH3	22
5	H	$\beta$ -OH, $\alpha$ -H	CH3	CH2OH	21
6	H	O	CH3	CH2OH	21
7	H	O	CH3	CH2OAc	21
8	H	O	CH3	COOH	21, 23
9	H	$\beta$ -OAc, $\alpha$ -H	CH3	COOH	21, 23
10	OAc	$\beta$ -OAc, $\alpha$ -H	CH3	COOMe	24

TABELA 1.1: DESLOCAMENTOS QUÍMICOS DE  $^{13}\text{C}$  ( $\delta\text{C}$ ) DE TRITERPENOS DO TIPO TARAXERANO.a

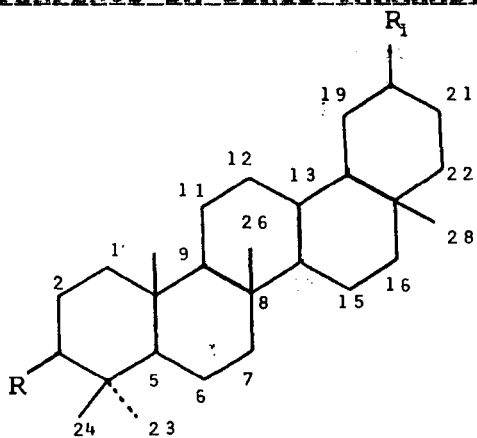
TIPO										
ESTRUTURAL	040	040	041	040	040	041	041	041	040	040
REFERÊNCIA	21	22	21	22	22	21	21	21 23	21 23	24
SUBS./CARB.	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
C										
4	39.1	37.9	47.6	41.1	41.4	47.5	47.6	47.5	37.6	39.3
8	38.9	39.1	38.9	39.1	39.3	39.0	39.0	38.9	39.0	?
10	37.9	37.6	37.6	37.8b	37.8	37.5	37.4	37.3	37.3	38.9
13	37.9	37.8	37.7	37.9b	38.3	37.7	37.7	37.8	37.9	37.3
14	158.1	158.0	157.6	157.7	158.7	158.5	158.3	162.1	160.5	160.1
17	38.1	35.8	37.7	35.9	38.3	40.3	39.0	51.5	51.5	51.3
20	29.0	28.8	28.8	28.9	28.8	28.5	28.5	29.3	29.3	28.2
CH										
3	79.2	81.1	217.3*	80.4	78.2	217.2*	217.2*	217.3*	80.8	80.6
5	55.7	55.7	55.8	56.4	56.0	55.7	55.8	55.7	55.6	55.2
9	48.9	49.3	48.7	49.5	45.6	48.7	48.6	48.6	49.0	49.1
15	117.0	116.9	117.2	117.2	116.8	116.0	116.2	117.1	116.8	116.8
18	49.4	48.9	48.8	48.9	49.6	44.9	44.6	41.4	41.3	41.9
CH2										
1	38.1	37.8	38.4	37.6	37.8	38.3	38.4	38.4	37.4	43.2
2	27.3	23.4	34.1	23.6	28.0	34.0	34.1	34.1	23.4	70.0*
6	19.0	18.8	20.0	19.9	19.2	19.9	19.9	21.5	18.7	18.6
7	35.3	33.2	35.2	33.8	36.3	35.8	35.7	35.4	35.3	35.5
11	17.7	17.6	17.5	17.8	17.9	17.3	17.3	17.3	17.3	17.4
12	35.9b	36.7	35.8	33.2	31.2b	30.7b	31.0b	31.3b	31.2	31.7
16	36.9b	33.7	36.7	37.7	33.2b	32.6b	32.6b	30.7	30.6	31.0
19	41.4	41.3	40.7	41.7	41.7	40.6	40.6	40.3	40.7	40.8
21	33.9	35.2	33.6	35.2	33.8	33.3	33.5	33.7	33.6	33.8
22	33.2	37.5	33.1	36.8	28.7	27.9	28.3	31.9b	31.8	32.1
CH3										
23	28.1	28.0	26.2	22.6	28.4	26.1	26.1	26.1	27.9	29.7
24	15.6	16.5	21.5	65.5*	16.5	21.6	21.8	20.0	16.0	17.5
25	15.6	15.5	14.8	15.4	15.7	14.8	14.8	15.0	15.7	16.5
26	30.1	26.0	29.9	25.8	30.1	29.8	29.8	28.7	28.6	28.3
27	26.0	29.9	25.6	30.0	26.2	25.7	25.7	25.9	26.2	26.1
28	30.1	29.9	29.9	29.9	64.6*	65.4*	65.9*	184.4*	184.4*	178.3*
29	33.5	33.4	33.4	33.4	33.8	33.5	33.3	33.2	33.3	33.3
30	21.5	21.3	21.4	21.4	22.0	21.4	21.5	22.6	22.4	22.4

a- Todos os espectros foram obtidos em  $\text{CDCl}_3$  a 25MHz, exceto as substâncias 2 e 4 ( 100 MHz ) e 10 ( 20 MHz ).

b- os valores podem estar trocados dentro de uma mesma coluna.

\*- multiplicidade alterada.

TRITERPENOS DA SÉRIE TARAXASTERANO



SUBSTÂNCIA	R	R1	$\Delta$	REF.
11	OH	CH <sub>2</sub>	20 (30)	15
12	OH	CH <sub>3</sub>	20 (21)	15, 25
13	OAc	CH <sub>2</sub>	20 (30)	16, 26
14	OAc	CHO	20 (21)	26, 27
15	OAc	H	20 (21)	26

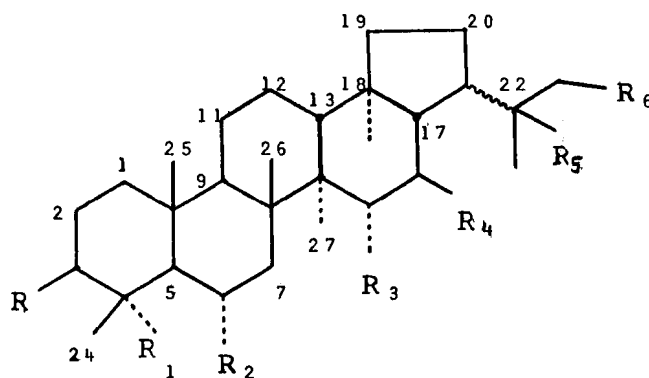
TABELA 1.2: DESLOCAMENTOS QUÍMICOS DE  $^{13}\text{C}$  ( $\delta\text{c}$ ) DE TRITERPENOS DO TIPO TARAXASTERANO.a

TIPO	050	051	050	051	051
ESTRUTURAL	050	051	050	051	051
REFERENCIA	15	15 25	16 26	26 27	26
SUBS./CARB.	11	12	13	14	15
C					
4	38.8	38.9	37.8	37.8	37.8
8	40.9	41.1	41.0	41.1	41.1
10	37.1	37.1	37.1	37.1	37.1
14	42.0	42.3	42.1	42.3	42.4
17	34.5	34.4	34.6	34.8	34.4
20	154.6	139.8	154.6	148.5	135.1
CH					
3	79.0	79.0	80.9	81.0	81.0
5	55.4	55.3	55.5	55.4	55.4
9	50.5	50.4	50.5	50.4	50.2
13	39.2	39.2	39.4	39.1	39.3
18	48.7	48.7	48.8	48.3	47.8
19	39.4	36.3	39.2	29.4	32.5
CH2					
1	38.8	38.8	38.5	38.5	38.5
2	27.4	27.4	23.8	23.7	23.7
6	18.3	18.3	18.2	18.2	18.2
7	34.1	34.3	34.1	34.2	34.2
11	21.4	21.6	21.5	21.5	21.6
12	26.2	27.6	25.7	27.3	28.0
15	26.6	27.0	26.7	26.9	26.9
16	38.3	36.7	38.9	43.0	42.1
21	25.6	118.9*	26.2	149.0*	122.2*
22	38.9	42.2	38.4	36.5	29.7
30	107.2	21.7*	107.2	193.9*	--
CH3					
23	28.0	28.0	28.0	28.0	28.0
24	15.4	15.4	16.5	16.5	16.5
25	16.8	16.3	15.9	16.0	16.1
26	15.9	16.1	16.4	16.3	16.3
27	14.8	14.8	14.8	14.7	14.5
28	19.5	17.7	25.5	23.2	24.3
29	25.5	22.5	19.5	17.5	17.8

a- Todos os espectros foram obtidos em  $\text{CDCl}_3$  a 67,9 MHz, exceto as substâncias 1,3 e 5 (potência não mencionada na referência).

\*- multiplicidade alterada.

## TRITERPENOS DA SÉRIE HOPANO



SUBSTANCIA	R	R1	R2	R3	R4	R5	R6	C22	$\Delta$	REF.
16	H	CH3	H	OH	H	OH	H	$\alpha$	-	28
17	H	CH3	H	OAc	H	OH	H	$\alpha$	-	28
18	OAc	CH3	H	OAc	H	OH	H	$\alpha$	-	28
19	H	CH3	H	H	H	H	H	$\alpha$	-	29
20	H	CH3	H	H	H	H	H	$\alpha$	22(29)	29
21	H	CH3	H	H	H	H	H	$\beta$	-	29
22	H	CH3	H	H	H	H	H	$\beta$	22(29)	29
23	H	CH3	H	H	H	H	H	-	21(22)	29
24	H	CH3	H	H	H	H	H	$\beta$	17(21)	29
25	H	CH3	H	H	H	H	H	$\alpha$	-	29
26	H	CH3	H	H	H	H	H	-	21(22)	29
27	H	CH3	H	H	H	H	H	$\beta$	-	29
28	H	CH3	H	H	H	OH	OAc	$\alpha$	-	30
29	H	CH3	OAc	H	H	OH	H	$\alpha$	-	30
30	H	CH3	OAc	H	OAc	OH	H	$\alpha$	-	30
31	H	COOMe	H	H	OH	OH	H	$\alpha$	-	30

TABELA 1.3: DESLOCAMENTOS QUÍMICOS DE  $^{13}\text{C}(\delta\text{C})$  DE TRITERPENOS DO TIPO HOPANO. a

TIPO	060	060	061	060	060	060	060	060	060	060
REFERENCIA	28	28	28	29	29	29	29	29	29	29
SUBS./CARB	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25
C										
4	33.2	33.1	37.1	33.3	33.3	33.3	33.3	33.3	33.4	33.3
8	43.5	43.3	43.1	41.9	42.1	42.4	42.3	42.0	41.9	42.2
10	37.6	37.5	37.6	37.5	37.5	37.5	37.5	37.5	37.5	37.6
14	47.2	45.8	45.8	41.8	41.9	42.0	42.0	41.6	41.9	41.5
18	44.2	43.9	43.9	44.4	44.8	44.6	44.3	44.4	49.8	44.2
CH										
5	55.8	55.5	54.6	56.2	56.1	56.2	56.2	56.2	56.3	56.5
9	50.6	50.4	50.2	50.5	50.4	50.6	50.5	50.5	50.9	51.1
13	49.0	49.0	49.0	49.4	49.5	48.7	48.8	48.2	49.3	39.1
17	50.5	50.1	50.1	54.7	54.9	53.3	54.0	56.0	140.0*	49.4
21	50.5	50.4	50.4	47.9	46.5	45.6	48.0	135.4*	136.0*	47.7
22	73.8*	73.5*	73.4*	32.0	148.7*	28.9	148.3*	120.7*	26.4	31.0
CH2										
1	40.4	40.4	38.5	40.4	40.4	40.4	40.4	40.4	40.4	40.4
2	18.7	18.7	26.8	18.8	18.7	18.8	18.8	18.8	18.7	18.8
3	42.0	41.9	80.8*	42.2	42.1	42.2	42.2	42.2	42.1	42.2
6	18.9	21.5	21.2	18.8	18.7	18.8	18.8	18.8	18.7	18.8
7	36.8	35.0	34.9	33.4	33.3	33.4	33.4	33.3	33.4	33.2
11	20.9	20.7	20.8	21.0	20.9	21.0	21.0	21.0	21.3	21.7
12	24.1	23.8	23.6	24.0	24.0	23.9	24.1	23.8	24.1	23.8
15	74.9*	76.8*	76.7*	33.7	33.6	32.8	32.7	32.9	31.8	26.8
16	32.6	28.5	28.5	22.7	21.6	21.7	21.0	23.3	19.1	22.2
19	40.9	40.8	40.8	41.7	41.9	39.9	40.3	39.1	41.6	41.7
20	26.9	26.8	23.6	27.7	27.4	22.8	27.4	28.5	27.5	25.0
CH3										
23	33.4	33.4	28.5	33.4	33.4	33.5	33.5	33.5	33.4	33.5
24	21.6	22.0	21.9	21.6	21.6	21.7	21.7	21.7	21.6	21.7
25	15.8	15.7	15.7	15.9	15.9	15.9	16.0	15.9	16.2	16.1
26	15.8	15.7	15.8	16.6	16.7	16.8	16.7	16.7	16.4	16.4
27	11.7	12.8	12.7	16.7	16.7	16.8	16.9	16.7	15.0	16.7
28	17.4	17.4	16.4	15.9	16.1	15.3	15.2	14.8	19.1	22.1
29	28.7	28.5	27.9	22.9	110.1*	17.6	19.5*	19.3	21.3	18.4
30	31.0	31.1	31.0	23.9	25.0	22.2	19.7	22.8	21.9	24.1

a- todos os espectros foram obtidos em  $\text{CDCl}_3$  à 22.5 MHz, exceto as substâncias 1-3 (50.0 MHz) e 4 (25.2 MHz).

\*- multiplicidade alterada.

TABELA 1.3 : DESLOCAMENTOS QUÍMICOS DE  $^{13}\text{C}$ ( $\delta\text{c}$ ) DE TRITERPENOS DO TIPO HOPANO. a

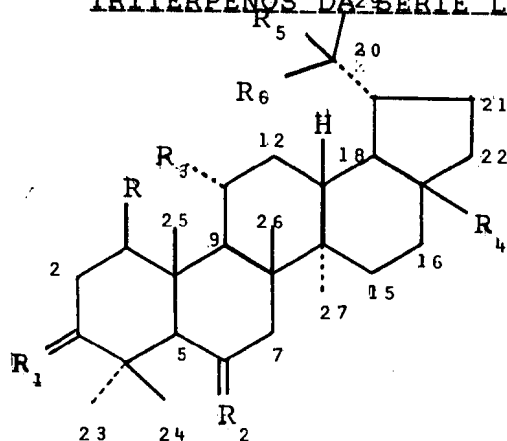
TIPO	060	060	060	060	060	060
ESTRUTURAL	060	060	060	060	060	060
REFERÊNCIA	29	29	30	30	30	30
SUBS./CARB.	26	27	28	29	30	31
C						
4	33.3	33.3	33.2	33.0	33.1	47.7
8	41.7	42.4	41.9	42.6	42.7	42.3
10	37.6	37.5	37.4	39.4	39.4	36.7
14	42.1	40.7	41.8	41.8	44.0	44.0
18	44.3	44.4	44.0	43.8	46.5	45.8
CH						
5	56.6	56.6	56.0	58.3	58.2	51.1
9	51.0	51.2	50.3	49.2	49.1	50.5b
13	42.8	43.1	49.8	49.7	48.5	49.0
17	49.4	51.2	53.6	53.8	56.8	60.6
21	140.4*	48.3	46.3	50.9	51.6	49.8b
22	122.7*	28.9	74.1*	73.5*	72.9*	74.1*
CH2						
1	40.4	40.4	40.3	40.1	40.1	39.3
2	18.8	18.9	18.7	18.3	18.3	17.7
3	42.2	42.2	42.1	41.1c	40.9c	36.6
6	18.6	18.6	18.7	71.7*	71.6*	21.6
7	33.2	33.0	33.4	40.8c	40.7c	32.8
11	21.5	21.6	20.9	20.9	20.7	20.6
12	24.6	24.3	24.2	23.8	23.3	23.5
15	32.2	33.0	34.3	34.2	41.4c	41.5
16	25.8	20.6	20.9	21.7	73.1*	66.8*
19	41.4	44.4	41.2	43.4	43.3	43.7
20	28.4	20.6	25.4	26.5	27.7	27.8
CH3						
23	33.5	33.5	33.2	36.2	36.2	179.3*
24	21.7	21.7	21.6	22.0	22.0	16.6
25	16.1	16.0	15.8	17.0	16.9d	16.1c
26	20.7	22.0	15.8	17.9	18.0	16.3c
27	16.6	16.6	17.0	17.0	18.0	18.3
28	23.0	22.7	16.0	16.0	17.0d	17.1
29	21.0	21.7	70.7*	28.7	27.4	17.1
30	21.5	26.7	22.0	30.8	30.3	30.8

a- todos os espectros foram obtidos em  $\text{CDCl}_3$  à 25.2 MHz, exceto as substâncias 26 e 27 ( 22.5 MHz ).

b,c,d- os valores podem estar trocados dentro de uma mesma coluna.

\*- multiplicidade alterada.

## TRITERPENOS DA SÉRIE LUPANO

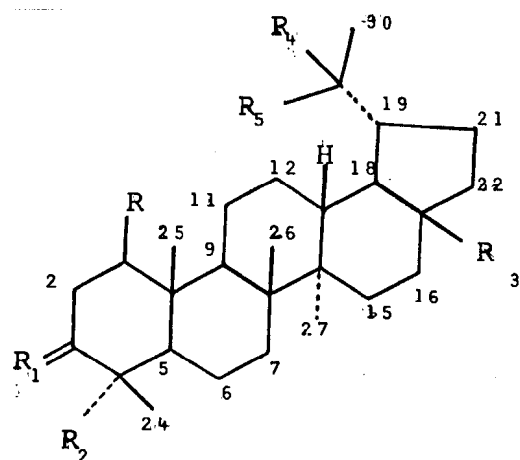


Δ

SUBSTÂNCIA	R	R1	R2	R3	R4	R5	R6		REF.
32	H	βOH, αH	H2	H	CH3	H	CH3	-	31
33	H	βOH, αH	H2	H	CH3	-	CH2	20 (29)	15, 34
34	H	O	H2	H	CH3	-	CH2	20 (29)	31, 34
35	H	βOAc, αH	H2	H	CH3	-	CH2OAc	20 (29)	35
36	H	O	H2	H	CH3	OH	CH3	-	34
37	H	βOH, αH	H2	OH	CH3	H	CH3	-	31
38	H	βOH, αH	H2	H	COOMe	-	CH2	20 (29)	36
39	H	O	H2	OH	CH3	-	CH2	20 (29)	31
40	H	O	βOH, αH	H	CH3	-	CH2	20 (29)	34
41	H	O	βOH, αH	H	CH3	OH	CH3	-	34
42	H	O	O	H	CH3	OH	CH3	-	23
43	H	O	βOH, αH	H	CH2OH	-	CH2	20 (29)	34
44	OH	βOH, αH	H2	H	CH3	-	CH2	20 (29)	37
45	OH	O	H2	OH	CH3	-	CH2	20 (29)	37
46	OH	O	H2	OH	CH3	OH	CH3	-	37



## TRITERPENOS DA SÉRIE LUPANO



SUBSTÂNCIA	R	R1	R2	R3	R4	R5	$\Delta$	REF.
47	H	O	CH3	COOH	-	CH2	20(29)	23
48	H	$\beta$ OH, $\alpha$ H	CH2OH	CH3	-	CH2	20(29)	23
49	OH	$\alpha$ OH, $\beta$ H	CH3	CH3	-	CH2	20(29)	23
50	OH	O	CH3	CH3	-	CH2	20(29)	23
51	-	O	CH3	CH3	=	CH2	20(29)	1 23
52	H	$\beta$ OMe, $\alpha$ H	CH3	CH3	-	CH2	20(29)	41
53	H	$\alpha$ OH, $\beta$ H	COOH	COOH	-	CH2	20(29)	44
54	H	$\alpha$ OH, $\beta$ H	COOMe	COOMe	-	CH2	20(29)	44
55	H	$\alpha$ OAc, $\beta$ H	COOH	COOH	-	CH2	20(29)	44
56	H	O	COOMe	COOMe	-	CH2	20(29)	44
57	H	$\alpha$ OH, $\beta$ H	COOMe	COOMe	-	CH2	20(29)	44
58	H	$\beta$ OAc, $\alpha$ H	CH3	CH3	H	CHO	-	46
59	H	$\beta$ OAc, $\alpha$ H	CH3	CH3	H	CH2OH	-	46
60	H	$\beta$ OAc, $\alpha$ H	CH3	CH3	H	COOH	-	46

TABELA 1.4: DESLOCAMENTOS QUIMICOS DE  $^{13}\text{C}$  ( $\delta\text{C}$ ) DE TRITERPENOS DO TIPO LUPANO.a

TIPO	020	021	023	021	022	020	021	023	023	022
ESTRUTURAL	020	021	023	021	022	020	021	023	023	022
REFERENCIA	31	15 34	31 34	35	34	31	36	31	34	34
SUBS./CARB.	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41
C										
4	38.8	38.8	47.2	37.8	47.2	39.4	39.0	47.7	49.0	48.9
8	40.8	40.8	40.7	41.0	41.4	43.0	41.0	43.2	40.0	40.7
10	37.1	37.1	36.8	37.1	36.8	39.7	37.4	38.5	36.6	36.8
14	43.0	42.8	42.8	42.8	43.6	43.2	42.6	42.7	42.2	43.9
17	43.1	43.0	42.9	43.0	44.6	43.5	56.8	42.9	43.2	44.6
CH										
3	78.8	78.9	217.9*	80.9	217.8*	78.8	79.3	218.3*	216.7*	216.8*
5	55.2	55.3	54.8	55.4	54.9	56.1	55.7	55.1	56.6	56.6
9	50.1	50.4	49.7	50.4	50.0	56.1	50.9	55.3	50.7	50.6
13	37.8	38.0	38.1	38.1	37.7	37.4	38.5	37.5	37.2	36.8
18	47.5	48.2	48.2	49.0	48.3	47.7	47.2	47.9	48.3	48.5
19	43.8	47.9	47.8	44.4	49.7	45.0	49.8	48.0	48.0	50.1
20	29.6	150.9*	150.5*	149.3*	73.4*	29.6	150.9*	150.4*	150.8*	73.4*
CH2										
1	38.7	38.7	39.5	38.5	39.6	41.6	39.0	42.3	43.0	42.5
2	27.4	27.4	34.0	23.7	34.6	27.8	27.6	34.2	34.5	34.4
6	18.3	18.3	19.6	18.2	19.7	18.4	18.4	19.8	69.7*	69.7*
7	34.4	34.2	33.5	34.3	33.9	35.8	34.6	34.4	42.2	42.1
11	20.9	20.9	21.4	23.7	22.0	70.8*	21.1	70.8*	21.3	21.8
12	26.8	25.1	25.1	26.5	28.7	39.8	25.8	37.8	25.2	28.7
15	27.4	27.4	27.4	27.5	27.6	28.1	30.9	27.7	27.5	27.7
16	35.5	35.5	35.4	35.5	35.6	35.8	32.4	35.6	35.5	35.6
21	21.9	29.8	29.8	31.4	29.7	22.2	29.9	29.8	29.8	29.1
22	40.4	40.0	39.9	39.9	40.2	40.5	37.4	40.0	39.9	40.2
CH3										
23	28.0	28.0	26.0	28.0	26.7	28.6	28.1	27.6	25.0	24.9
24	15.4	15.4	21.0	16.1	21.0	15.7	15.4	20.9	23.7	23.7
25	16.0	16.1	15.8	16.5	16.0	17.5	16.1	17.0	17.0	17.5
26	16.0	15.9	15.9	16.2	16.0	16.5	16.1	16.7	17.1	17.0
27	14.4	14.5	14.4	14.6	14.8	14.8	14.8	14.6	14.8	15.2
28	18.0	18.0	18.0	17.8	19.2	18.5	177.0*	18.2	18.0	19.2
29	15.1	109.3*	109.2*	66.0*	31.6	15.3	109.5*	110.0*	109.4*	31.7
30	23.0	19.3	19.3	110.2*	24.8	23.1	19.5	19.5	19.3	25.2

a- todos os espectros foram obtidos em  $\text{CDCl}_3$  a 25MHz, exceto as substancias 2 e 4 (100 MHz) e 10 (20 MHz).

\*- multiplicidade alterada.

TABELA 1.4: DESLOCAMENTOS QUÍMICOS DE  $^{13}\text{C}$  (c) DE TRITERPENOS DO TIPO LUPANO. a

TIPO	022	023	021	023	022	023	021	021	023	023
ESTRUTURAL	022	023	021	023	022	023	021	021	023	023
REFERENCIA	23	34	37	37	37	23	23	23	23	23
SUBS./CARB.	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51
C										
4	48.5	48.9	38.9	47.3	47.3	47.3	41.0	37.5	47.1	44.6
8	41.0	40.2	41.3	42.4b	43.6	40.6	40.4	41.7	41.0	39.5
10	46.2	36.5	43.5	43.9b	44.6	36.8	37.1	43.7	45.1	41.7
14	44.4	43.1	42.8	42.6b	43.8	42.4	43.0b	42.9b	42.9	43.1b
17	43.9	47.8	42.9	42.9	42.9	56.3	42.9b	43.0b	42.9	43.0b
CH										
3	214.6*	216.6*	75.7	216.4*	216.3*	218.1*	76.7	76.9	216.1*	205.5*
5	65.1	57.0	53.1	50.8	50.6	54.8	42.9	47.9	51.2	53.4
9	50.2	50.7	51.4	55.2	56.1	49.8	50.3	51.3	50.6	44.4
13	37.3	34.0	38.0	36.7	36.9	38.5	38.1	37.7	37.9	38.2
18	48.1	47.8	48.3	47.6c	48.4	49.1	48.0c	48.1c	47.9b	48.1
19	50.1	47.9	47.9	47.7c	50.5	46.8	48.3c	48.4c	48.2b	47.9
20	73.3*	150.3*	150.8*	150.2*	72.1*	150.2*	151.0*	150.8*	150.7*	150.7*
CH2										
1	43.4	42.2	79.0*	78.6*	79.4*	39.6	33.0	75.9*	79.5*	159.8*
2	33.8	34.5	37.5	43.0	44.2	34.0	27.4	36.4	42.9	125.1*
6	211.6*	69.6*	18.0	19.5	19.9	19.5	18.1	18.5	19.6	19.0
7	52.2	42.2	34.1	33.6	34.2	33.6	33.8	34.1	32.9	33.8
11	21.7	21.2	23.8	69.4*	69.3*	21.3	20.9	23.9	22.9	21.4
12	28.6	25.4	25.0	36.3	35.9	25.4	25.1	25.2	25.1	25.1
15	27.6	27.2	27.4	27.4	28.0	29.6	26.5	27.5	27.5	27.3
16	35.4	36.8	35.5	35.3	39.9	32.0	35.6	35.7	35.5	35.5
21	28.2	29.8b	29.7	29.7	28.6	30.5	29.9	29.8	29.8	29.8
22	39.9	29.2b	39.9	39.7	40.2	36.8	40.0	40.0	40.0	40.0
CH3										
23	24.1	25.1	27.8	28.7	28.8	26.6	71.4*	27.6	28.0	27.8
24	21.9	23.8	14.9	19.6	19.6	20.9	19.8	22.0	19.8	21.3
25	16.4b	17.0	11.9	13.5	14.9	15.8	16.2	11.5	11.9	?
26	16.2b	17.1	16.2	17.0	17.3	15.9	16.0	16.3	15.9	16.5
27	15.2	15.1	14.4	14.3	14.2	14.6	14.7	14.6	14.4	14.4
28	19.2	60.5*	18.0	18.0	20.0	181.8*	17.8	18.1	18.1	18.1
29	32.0	109.8*	109.4*	110.1*	25.3	109.7*	109.3*	109.5*	109.5*	109.5*
30	24.5	19.5	19.2	19.3	32.5	19.3	19.3	19.3	19.3	19.2

a- todos os espectros foram obtidos em  $\text{CDCl}_3$  à 25.2 e 67.9 MHz.

\*- multiplicidade alterada.

TABELA 1.4: DESLOCAMENTOS QUÍMICOS DE  $^{13}\text{C}$  ( $\delta\text{C}$ ) DE TRITERPENOS DO TIPO LUPANO. a

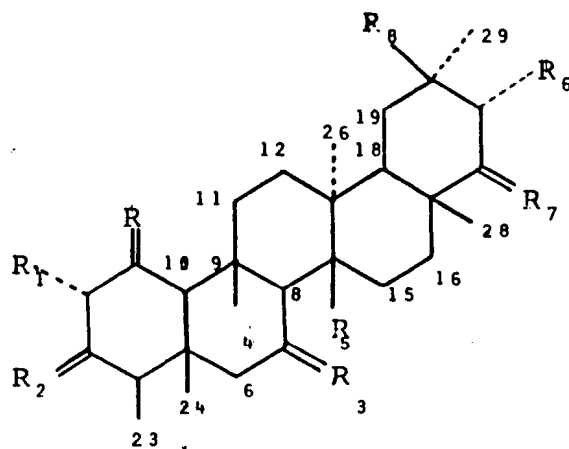
TIPO									
ESTRUTURAL	021	021	021	021	023	021	020	020	020
REFERÊNCIA	41	44	44	44	44	44	46	46	46
SUBS./CARB.	52	53	54	55	56	57	58	59	60
C									
4	38.7	51.6	51.8	49.9	61.3	54.0	37.9	37.9	37.9
8	40.9	41.5	41.3	41.5	40.9	41.1	40.9	41.0	40.9
10	37.2	37.2	37.0	37.0	36.3	36.7	37.1	37.1	37.1
14	42.9	42.8	42.7	42.8	42.6	42.5	43.1	43.1	43.1
17	42.9	56.4	56.7	56.4	56.5	56.5	43.0	43.1	43.1
CH									
3	88.7	72.5	72.6	75.8	210.9*	75.6	80.9	81.0	81.0
5	56.0	44.9	45.3	45.5	51.2	51.3	55.4	55.4	55.3
9	50.5	50.7	50.6	50.7	50.0	50.6	49.9	50.0	49.9
13	38.1	38.4	38.3	38.3	38.3	38.3	37.9	38.1	37.9
18	48.4b	49.5	49.6	49.5	49.5	49.5	49.0	47.5	48.7
19	48.1b	47.4	47.0	47.2	47.0	47.0	42.8	43.7	43.5
20	29.9	151.0*	150.6*	150.9*	150.5*	150.5*	49.0	38.0	41.9
CH2									
1	38.7	32.7	32.4	33.1	38.8	38.5	38.4	38.4	38.4
2	22.3	25.7	25.0	22.6	34.6	26.7	23.7	23.7	23.7
6	18.3	20.8	20.8	20.9	21.4b	21.0	18.2	18.3	18.2
7	34.4	34.4	34.0	34.2	33.4	33.9	34.3	34.3	34.3
11	21.0	21.5	21.5	21.4	21.2b	21.3	20.9	21.0	20.9
12	25.3	25.8	25.6	25.7	25.5	25.5	27.6b	27.2b	27.0b
15	27.5	29.9	29.7	29.9	29.7	29.7	27.3	27.3b	27.4
16	35.7	32.7	32.2	32.7	32.1	32.2	35.3	35.5	35.4
21	40.1	30.9	30.7	30.9	30.6	30.6	25.2b	23.1	23.8b
22	150.9*	37.4	37.0	37.3	36.9	36.9	40.0	40.2	39.7
CH3									
23	28.0	180.0*	178.1*	177.7*	173.8*	178.1*	28.0	28.0	28.0
24	16.1	17.5	16.9	17.2	16.6c	10.6	16.6	16.5	16.6
25	16.1	16.6	16.5	16.5	15.6c	15.8b	16.1c	16.0c	16.2c
26	16.1	16.4	16.2	16.3	15.8c	16.5b	16.0c	16.1c	16.0c
27	14.6	14.8	14.8	14.9	14.7	14.8	14.4	14.5	14.4
28	18.1	178.9*	176.7*	178.9*	176.5*	176.6*	18.0	18.1	17.8
29	109.3*	109.6*	109.6*	109.5*	109.6*	109.6*	207.0*	64.5*	?
30	19.4	19.4	19.3	19.5	19.4	19.4	14.5	17.7	17.2

a- todos os espectros foram obtidos em  $\text{CDCl}_3$  à 50.3 MHz, exceto as substâncias 52 e 58-60 (potência não mencionada na referência).

b,c- os valores podem estar trocados dentro de uma mesma coluna.

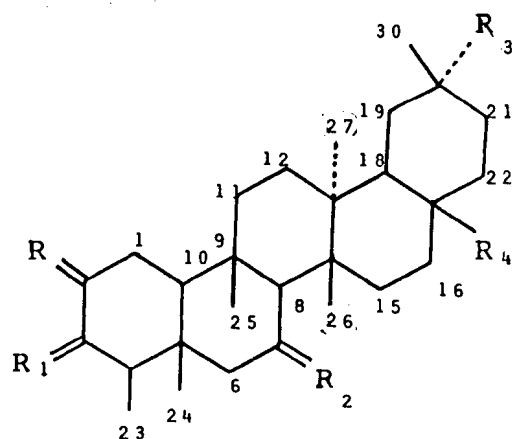
\*- multiplicidade alterada.

## TRITERPENOS DA SÉRIE FRIEDELANO



SUBSTANCIA	R	R1	R2	R3	R4	R5	R6	R7	R8	REF.
61	H2	H	O	H2	CH3	CH3	H	H2	CH3	35, 47, 50, 53
62	H2	H	H2	O	CH3	CH3	H	H2	CH3	47, 50
63	H2	H	H2	H2	CH3	CH3	H	O	CH3	47
64	H2	H	O	H2	CH3	CH3	H	H2	CH2OAc	35, 51
65	H2	H	O	H2	CH3	CH3	H	H2	COOMe	35
66	H2	H	O	H2	CH3	CH3	OH	H2	CH3	48, 49
67	H2	H	O	O	CH3	CH3	H	H2	CH3	47
68	H2	H	O	H2	CH3	CH3	H	O	CH3	47
69	H2	H	O	H2	CH3	CH2OH	OH	H2	CH3	49, 51
70	O	H	O	H2	CH2-O-CH2	H	H2	CH3		47
71	H2	H	O	H2	COOMe	CH3	H	H2	CH3	50
72	H2	H	H2	H2	COOMe	CH3	H	H2	CH3	50
73	H2	H	$\beta$ OAc	O	CH3	CH3	H	H2	CH3	50
74	H2	H	$\beta$ OAc	H2	CH3	CH3	H	H2	CH3	16, 51
75	H2	OAc	O	H2	CH3	CH3	H	H2	CH	51

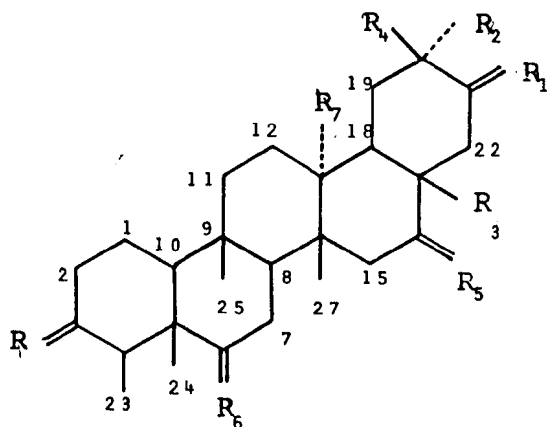
## TRITERPENOS DA SÉRIE FRIEDELANO



SUBSTANCIA	R	R1	R2	R3	R4	$\Delta$	REF.
76	$\alpha$ Py-O*	O	H2	CH3	CH3	-	51
77	$\beta$ OH	O	H2	CH3	CH3	-	51
78	$\beta$ OAc	O	H2	CH3	CH3	-	51
79	O	$\alpha$ OH	H2	CH3	CH3	-	51, 53
80	O	$\alpha$ OAc	H2	CH3	CH3	-	51, 53
81	O	-OH	H2	CH3	CH3	3	51
82	O	-OAc	H2	CH3	CH3	3	51
83	H2	$\beta$ OH	O	CH3	CH3	-	51
84	H2	O	H2	CH3	CH2OH	-	51
85	$\alpha$ OH	$\alpha$ OH	H2	CH3	CH3	-	51
86	$\alpha$ OAc	$\alpha$ OAc	H2	CH3	CH3	-	51
87	$\beta$ OAc	$\alpha$ OAc	H2	CH3	CH3	-	51
88	$\alpha$ OAc	$\beta$ OAc	H2	CH3	CH3	-	51
89	$\beta$ OAc	$\beta$ OAc	H2	CH3	CH3	-	51
90	H2	O	H2	CH2OH	CH3	-	35, 51
91	H2	H2	H2	CH3	CH2OH	-	51

\*- Py-O = N-oxi-piridina

TRITERPENOS DA SERIE FRIEDELANO



SUBSTÂNCIA	R	R1	R2	R3	R4	R5	R6	R7	REF.
92	H2	H2	CH3	CH3	CH2OH	H2	H2	H	51
93	H2	H2	CH2OH	CH3	CH3	H2	H2	H	51
94	H2	H2	CHO	CH3	CH3	H2	H2	H	51
95	O	H2	CH2OH	CH2OH	CH3	H2	H2	H	51
96	O	H2	CH3	CH3	CH2OH	H2	H2	H	51
97	O	H2	CH3	CH3	CH3	βOH	H2	H	51
98	O	H2	CH3	CH3	CH3	O	H2	H	51
99	H2	O	CH3	CH3	CH3	H2	H2	H	51
100	H2	H2	CH3	CH3	CH3	H2	O	H	16,52
101	O	O	CH3	CH3	CH3	H2	H2	H	16,52
102	O	H2	CH3	CH3	CH3	H2	O	H	16,52
103	O	O	CH3	CH3	CH3	H2	O	H	16,52
104	H2	H2	CH3	CH3	CH3	H2	H2	OH	54
105	O	H2	CH3	CH3	CH3	H2	H2	OH	54,55
106	O	O	CH3	CH3	CH3	H2	H2	OH	54,55

TABELA 1.5: DESLOCAMENTOS QUÍMICOS DE  $^{13}\text{C}$  ( $\delta\text{c}$ ) DE TRITERPENOS DO TIPO FRIEDELANO. a

TIPO	031	030	030	031	031	031	031	031	031	031
ESTRUTURAL	031	030	030	031	031	031	031	031	031	031
REFERÊNCIA	35 47	47 50	47	35	35	48 49	47	47	49	47
SUBS./CARB.	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70
C										
5	42.1	44.1	37.6	42.1	42.1	42.1	47.1	42.1	42.2	37.5
9	37.4	37.7	37.2	37.5	37.5	37.5	42.5	37.6	37.5	37.1
13	38.3	39.5b	38.7	38.3	38.1	39.0	39.5	38.6	39.6	38.1
14	39.7	41.5b	39.6	39.8	39.7	38.8	37.6	39.7	42.7	40.0
17	30.0	30.2	45.1	30.0	29.5	32.5	34.7	45.0	32.9	30.9
20	28.1	28.2	31.4	32.0	40.5	34.0	28.2	31.5	34.5	28.3
CH										
4	58.2	46.3	46.3	58.2	58.2	58.2	57.9	58.3	58.1	59.2
8	53.1	63.9	51.9	53.1	53.2	51.5	63.6	51.8	51.2	45.2
10	59.5	60.6	61.0	59.6	59.5	59.5	59.1	59.7	59.9	69.0
18	42.8	42.0	48.1	42.6	42.5	44.3	41.9	48.1	44.9	44.0
CH2										
1	22.3	21.2	20.8	22.3	22.3	22.3	21.8	21.3	22.3	202.6*
2	41.5	26.9	27.5	41.5	44.5	41.5	41.0	41.5	41.4	60.5
3	213.0*	30.2	31.1	212.6*	212.6*	213.2*	210.9*	212.6*	213.0*	203.7*
6	41.3	58.0	41.5	41.4	41.3	41.2	57.0	41.3	42.4	38.5
7	18.2	212.4*	18.2	18.3	18.2	18.2	210.4*	18.1	20.7	17.0
11	35.6	35.7	35.6	35.6	35.5	35.3	35.6	35.7	35.4	35.8
12	32.4	30.7	30.2	32.3	32.8	30.4	31.9	30.2	23.4	26.5
15	30.5	33.0	30.4	30.4	30.3	30.2	30.0	30.4	30.0	34.7
16	36.0	36.2	27.2	35.9	35.5	36.1	36.4	27.1	36.3	36.8
19	35.3	35.8	34.8	30.2	31.4	36.0	35.0	34.8	36.0	35.4
21	32.8	32.0c	49.7	28.2	28.6	74.3*	32.9	49.6	74.3*	32.5
22	39.2	38.9c	217.3*	38.1	38.3	47.0	38.8	217.3*	46.6	38.9
CH3										
23	6.8	15.1	13.6	6.8	6.8	6.8	7.0	6.8	6.7	7.5
24	14.6	13.7	15.1	14.7	14.6	14.7	15.3	14.7	14.4	15.7
25	17.9	19.5	18.0	18.0	17.6	18.2	19.4	18.1	17.9	67.1*
26	18.6	19.6	18.4	18.5	17.6	17.7	18.4	18.3	63.2*	19.3
27	20.3	18.3	18.5	20.1	20.9	19.3	19.6	18.5	20.2	69.9*
28	32.1	31.7	34.0	32.1	31.9	33.1	32.3	34.0	32.7	30.0
29	31.8	31.4	31.1	29.5	31.8	24.9	31.7	31.1	24.9	31.4
30	35.0	32.2	35.1	72.7*	179.4*	31.9	34.7	35.1	32.0	35.1

a- todos os espectros foram obtidos em  $\text{CDCl}_3$  à 25.0 MHz.

b,c- os valores podem estar trocados dentro de uma mesma coluna.

\*- multiplicidade alterada.



TABELA 1.5: DESLOCAMENTOS QUÍMICOS DE  $^{13}\text{C}$  ( $\delta\text{c}$ ) DE TRITERPENOS DO TIPO FRIEDELANO.

TIPO	031	030	032	032	031	031	031	031	032	032
REFERÊNCIA	50	50	50	16	51	51	51	51	51	51
SUBS./CARB.	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80
C										
5	41.1	38.8	44.4	37.8	43.0	42.9	43.0	42.4	38.0	38.1
9	48.5	48.3	37.7	37.0	36.7	37.3	37.3	37.4	37.6	37.4
13	38.8	37.6	39.5	38.3 <sub>b</sub>	39.5	39.4	39.7	39.7	39.6	39.5
14	39.9	39.8	42.7	39.6 <sub>b</sub>	38.2	38.0	38.3	38.3	38.2	38.1
17	29.9	30.0	30.3	29.2	29.8	29.7	29.9	29.9	29.9	29.9
20	28.4	28.1	28.2	28.1	28.0	27.8	28.1	28.1	28.1	28.0
CH										
4	58.0	47.0	50.2	48.0	53.2	56.4	55.5	56.1	54.4	50.2
8	52.9	53.1	63.7	53.1	53.1	52.4	53.1	53.1	53.1	52.9
10	59.1	60.0	59.8	60.9	54.2	56.7	56.6	57.2	60.3	59.6
18	42.8	42.8	42.0	42.2	42.7	42.5	42.8	42.8	42.7	42.6
CH2										
1	23.3	22.2	19.6	16.3	28.0	30.5	32.5	28.5	36.0	37.1
2	41.3	27.5	31.9	32.1	76.4*	76.9*	75.0*	76.4*	211.6*	204.4*
3	213.0*	30.6	74.3*	74.5*	207.8*	203.4*	212.0*	205.1*	76.9*	78.7*
6	41.1	41.4	57.6	41.6	40.9	40.4	41.2	41.0	40.6	40.7
7	18.1	18.1	211.2*	17.6	18.1	18.1	18.1	18.1	17.5	17.6
11	33.4	32.5	35.1	35.3	35.3	35.6	35.6	35.6	35.0	34.9
12	31.3	31.4	30.1	30.5 <sub>c</sub>	30.2	30.1	30.4	30.4	30.2	30.1
15	32.7	33.3	33.0	32.3 <sub>c</sub>	32.2	32.1	32.4	32.4	32.3	32.2
16	36.0	36.1	36.4	36.0	35.9	35.8	35.9	35.9	35.9	35.9
19	35.5	35.5	35.7	35.5	35.1	35.0	35.3	35.3	35.2	35.2
21	32.8	32.8	32.3	32.8	32.7	32.5	32.8	32.7	32.7	32.6
22	39.4	39.4	38.8	39.2	39.1	39.0	39.2	39.2	39.1	39.1
CH3										
23	6.8	15.1	14.8	11.2	6.3	6.6	6.5	6.5	10.7	10.6
24	13.0	11.9	10.0	15.7	13.9	14.7	14.7	14.5	14.0	13.9
25	174.3*	173.9*	19.5	18.1	17.7	17.8	18.0	17.9	17.3	17.3
26	20.4	20.5	19.6	18.5	18.5	18.3	18.6	18.5	18.4	18.4
27	18.9	18.9	18.3	20.0	19.9	19.9	20.1	20.1	20.1	20.0
28	32.0	31.7	31.7	32.0	32.0	31.8	32.0	32.0	32.0	31.9
29	35.1	35.1	34.7	34.9	31.7	31.5	31.7	31.7	31.7	31.6
30	32.6	32.1	32.2	31.7	34.8	34.8	34.9	34.9	34.9	34.9

a- todos os espectros foram obtidos em  $\text{CDCl}_3$  à 20.1 MHz.

b,c- os valores podem estar trocados dentro de uma mesma coluna.

\*- multiplicidade alterada.

TABELA 1.5: DESLOCAMENTOS QUÍMICOS DE  $^{13}\text{C}$  ( $\delta\text{c}$ ) DE TRITERPENOS DO TIPO FRIEDELANO.

TIPO										
ESTRUTURAL	032	032	032	031	032	032	032	032	032	031
REFERÊNCIA	51	51	51	51	51	51	51	51	51	51
SUBS./CARB.	81	82	83	84	85	86	87	88	89	90
C										
5	39.7b	40.4	43.4	41.9	37.8	38.1	37.9	37.4	37.3	42.2
9	36.7	36.8	43.4	37.3	36.4	36.3	36.9	36.3	37.0	37.5
13	39.6b	39.6	38.8	39.1	39.6	39.6	39.6	39.5	39.6	39.9
14	38.3	38.1	37.6	38.0	38.2	38.2	38.2	38.3	38.3	38.2
17	30.0	29.9	30.1	35.1	29.9	29.9	29.9	29.9	29.9	30.1
20	28.1	28.0	28.1	27.9	28.0	28.0	28.0	28.0	28.1	33.5
CH										
4	140.6*	140.8*	48.8	57.8	45.6	43.7	48.3	43.7	46.4	58.3
8	52.6	52.3	63.9	52.2	52.9	52.8	53.0	52.9	53.1	53.1
10	55.7	54.5	61.1	59.1	51.3	52.4	56.8	53.0	58.4	59.7
18	42.8	42.7	41.9	39.2	42.7	42.7	42.7	42.7	42.7	42.9
CH2										
1	32.0	33.9	16.8	22.1	26.6	24.8	25.5	21.5	22.2	22.3
2	194.9*	191.7*	34.7	41.3	69.6*	69.6*	75.4*	70.7*	73.4*	41.6
3	142.5*	156.8*	72.0*	212.6*	73.2*	73.5*	75.8*	73.8*	73.4*	212.9
6	38.4	37.8	58.2	41.0	41.0	40.8	40.9	41.2	41.2	41.4
7	17.9	17.9	210.3*	18.1	17.8	18.0	17.9	17.9	18.2	18.3
11	34.7	34.4	35.6	35.3	35.2	35.2	35.3b	35.2	35.5	35.7
12	30.2	30.1	30.1	29.9	30.5	30.2	30.2	30.2	30.5	29.4
15	32.3	32.1	31.6	31.3b	32.3	32.2	32.3	32.1	32.3	32.2
16	35.9	35.8	36.3	29.0	35.9	36.0	35.9	36.0	35.9	29.7
19	35.3	35.2	35.0	34.4	35.2	35.2	35.2b	35.2	35.2	30.6
21	32.7	32.6	32.9	31.4b	32.7	32.7	32.7	32.7	32.7	28.3
22	39.2	39.1	39.4	33.2	39.2	39.1	39.1	39.1	39.1	39.9
CH3										
23	10.3	11.3	11.6	6.7	9.6	9.3	9.7	10.3	10.8	6.8
24	17.6	17.5	16.3	14.5	13.4	13.5	14.4	15.1	15.8	14.7
25	18.4	18.4	18.3	18.0	17.8	18.0	17.7	17.5	17.5	18.0
26	18.8	19.0	19.5	18.9	18.6	18.4	18.5	18.4	18.5	18.6
27	20.0	20.0	19.5	19.1	20.1	20.0	20.0	19.9	20.0	20.0
28	32.1	32.0	32.1	67.0*	32.0	32.0	32.0	32.0	32.0	32.2
29	31.7	31.6	31.9	32.9	31.6	31.7	31.9	31.7	31.6	72.1
30	34.9	34.9	34.9	34.2	34.9	34.8	34.9	34.8	34.9	29.0

a- todos os espectros foram obtidos em  $\text{CDCl}_3$  à 20.1 MHz.

b- os valores podem estar trocados dentro de uma mesma coluna.

\*- multiplicidade alterada.

TABELA 1.5: DESLOCAMENTOS QUÍMICOS DE  $^{13}\text{C}$  ( $\delta\text{c}$ ) DE TRITERPENOS DO TIPO FRIEDELANO.

TIPO	030	030	030	030	031	031	031	031	030	030
REFERÊNCIA	51	51	51	51	51	51	51	51	16	16
SUBS./CARB.	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100
C										
5	37.5	37.6	37.5	37.6	42.1	42.2	42.3	42.1	37.6	53.1
9	37.1	37.0	37.0	37.1	37.5	37.5	37.6	37.7	37.1	38.0
13	38.2	38.3	38.4	38.1	39.6	40.0	39.3b	39.2	38.2b	39.1b
14	39.3	39.9	39.7	39.8	38.4	38.3	40.0b	40.5	39.8b	40.2b
17	29.2	30.5	30.0	29.4	35.2	29.8	32.1	45.3	33.2	30.0
20	28.1	33.1	33.4	38.0	33.3	33.2	28.0	27.6	42.7	28.1
CH										
4	46.1	46.1	46.1	46.2	58.3	58.3	58.3	58.2	46.0	37.6
8	52.5	53.5	53.1	53.3	52.5	53.5	53.5	52.4	53.4	55.3
10	60.7	60.7	60.8	60.7	59.7	59.6	59.7	59.4	60.7	62.1
18	39.5	41.8	42.7	44.4	38.9	42.0	44.8	44.0	41.9	42.9
CH2										
1	20.7	20.7	20.7	20.7	22.3	22.3	22.9	22.2	20.7	31.4
2	27.4	27.4	27.4	27.4	41.5	41.6	41.6	41.4	27.4	35.6
3	30.9	30.9	30.9	30.9	212.9*	212.2*	212.5*	212.5*	30.9	30.4
6	41.4	41.5	41.5	41.4	41.4	41.4	41.4	41.0	41.4	217.0*
7	18.1	18.1	18.1	18.1	18.3	18.3	18.7	18.6	18.2	32.7
11	35.3	35.5	35.4	35.4	35.5	35.7	35.8	35.4	35.4	36.4
12	30.2	30.7	30.7	30.5	30.0	29.8	30.8	29.1	32.7c	31.7c
15	31.2	32.6	32.1	32.6	31.1	32.8	44.4	50.2	30.8c	31.8c
16	34.2	35.9	36.0	36.2	29.2	36.0	75.6*	218.8*	37.0	35.4
19	34.5	39.5	38.1	42.4	31.5	30.6	35.8	35.5	35.2	35.7
21	32.8	29.7	29.3	24.9	30.2	27.9	32.1	31.7	219.2*	35.0
22	33.4	27.9	28.2	29.3	28.3	39.6	36.0	30.8	55.0	39.1
CH3										
23	15.1	15.1	15.1	15.1	6.8	6.8	6.8	6.8	13.6	11.9
24	13.5	13.5	13.5	13.5	14.7	14.7	14.7	14.7	15.1	17.9
25	18.3	18.1	18.2	17.6	18.2	17.9	18.2	17.3	17.9	18.1
26	19.2	18.4	18.6	17.9	18.7	18.4	20.0	20.3	18.4	18.5
27	19.0	20.7	19.9	20.7	19.1	20.8	21.5	16.2	21.1	20.4
28	68.0*	32.1	32.1	31.1	69.0*	32.1	24.9	27.4	33.5	26.7
29	31.3	25.8	72.0*	207.0*	73.4*	25.9	30.8	31.1	28.8	32.0
30	35.1	74.8*	28.9	27.1	28.6	74.8*	35.5	35.2	25.0	20.1

a- todos os espectros foram obtidos em  $\text{CDCl}_3$  à 20.1 MHz.

b,c- os valores podem estar trocados dentro de uma mesma coluna.

\*- multiplicidade alterada.

TABELA 1.5: DESLOCAMENTOS QUÍMICOS DE  $^{13}\text{C}(\delta\text{c})$  DE TRITERPENOS DO TIPO FRIEDELANO.

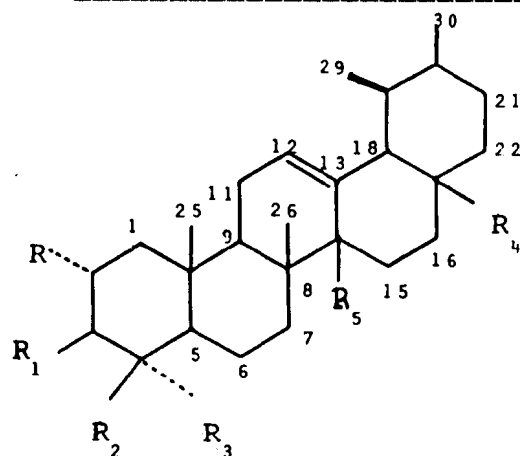
TIPO						
ESTRUTURAL	031	031	031	030	031	031
REFERÊNCIA	16	16	16	54	54	54
	52	52	52	55	55	55
SUBS./CARB.	101	102	103	104	105	106
C						
5	42.2	56.6	56.5	37.7	42.4	42.4
9	37.5	38.4	38.3	37.1	37.6	37.6
13	38.3b	39.2b	39.1b	42.2	42.4	42.4
14	40.0b	40.2b	40.5b	39.8	42.5	42.4
17	33.3	30.0	33.1	30.4	30.6	33.7
20	42.8	28.2	42.6	28.3	28.5	43.0
CH						
4	58.2	51.5	51.4	46.0	60.1	60.0
8	53.4	55.5	55.5	53.1	53.1	53.6
10	59.5	60.9	60.7	61.2	58.2	58.2
18	42.0	43.0	42.2	43.5	43.7	42.6
CH2						
1	22.4	35.1	35.5	20.8	22.5	22.5
2	41.6	41.6	41.5	27.4	42.6	42.6
3	213.0*	212.9*	212.2*	36.9	213.2*	212.9*
6	41.3	214.4*	213.6*	42.6	41.7	41.6
7	18.4	32.7	32.2	20.6	20.8	20.7
11	35.6	36.1	36.0	35.4	35.6	34.8
12	32.9c	32.1c	30.9c	23.7	24.2	24.5
15	30.7c	30.3c	30.3c	30.1	30.3	30.4
16	37.1	35.5	37.0	35.7	36.2	36.1
19	35.1	35.7	34.2	35.4	35.6	37.5
21	218.8*	35.7	218.2*	32.9	33.1	218.4*
22	55.1	39.2	54.8	39.1	39.3	55.0
CH3						
23	6.9	9.6	9.6	13.4	7.0	7.0
24	14.8	13.4	13.4	15.1	14.7	14.7
25	17.9	18.0	17.8	19.6	19.8	19.6
26	18.6	18.6	18.4	64.1*	64.3*	64.7*
27	21.4	21.1	21.1	18.0	17.9	17.5
28	33.6	32.0	33.5	31.7	32.1	33.1
29	28.9	20.0	28.7	34.4	34.7	28.8
30	25.1	31.7	24.9	31.9	31.9	25.0

a- todos os espectros foram obtidos em  $\text{CDCl}_3$  à 20.1 MHz.

b,c- os valores podem estar trocados dentro de uma mesma coluna.

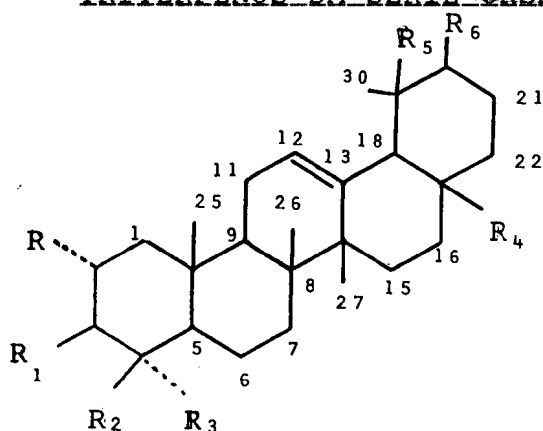
\*- multiplicidade alterada.

TRITERPENOS DA SÉRIE URSANO



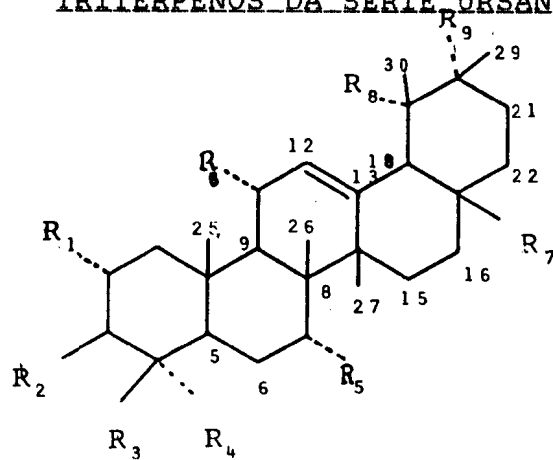
SUBSTÂNCIA	R	R1	R2	R3	R4	R5	REF.
107	H	OH	CH3	CH3	CH3	CH3	56
108	H	OAc	CH3	CH3	CH3	CH3	56
109	H	OH	CH3	CH3	COOH	CH3	59
110	H	OH	CH3	CH3	COOMe	CH3	56
111	H	OAc	CH3	CH3	COOMe	CH3	56
112	H	O	CH3	CH3	COOMe	CH3	56
113	OH	OH	CH3	CH3	COOMe	CH3	56, 61
114	OH	OH	CH3	CH3	COOMe	CH3	70
115	OAc	OAc	CH3	CH3	COOMe	CH3	36
116	OH	OH	CH3	CH3	COOMe	CH2	36
117	OAc	OAc	CH3	CH3	COOMe	CH2	36
118	H	OH	CH2OH	CH3	COOMe	CH3	62
119	H	OAc	CH3	COOMe	COOMe	CH3	64
120	OH	OH	CH2OH	CH3	COOMe	CH3	61, 62
121	OAc	OH	CH2OH	CH3	COOMe	CH3H	65

## TRITERPENOS DA SÉRIE URSANO



SUBSTÂNCIA	R	R1	R2	R3	R4	R5	R6	REF.
122	OH	OH	CH3	CH2OH	COOMe	H	CH3	36
123	OH	OH	CH3	CH2OAc	COOMe	H	CH3	65
124	OAc	OAc	CH3	CH2OAc	COOMe	H	CH3	36
125	OH	OH	CH3	CH2OH	COOMe	H	CH2	36
126	OAc	OAc	CH3	CH2OAc	COOMe	H	CH2	36
127	H	OH	CH3	CH3	COOMe	OH	CH3	59,60
128	H	OAc	CH3	CH3	COOMe	OH	CH3	59,60
129	H	OH	CH2OH	CH3	COOMe	OH	CH3	60
130	H	OAc	CH2OAc	CH3	COOMe	OH	CH3	60
131	H	OH	CH3	CH2OH	COOMe	OH	CH3	60
132	H	OAc	CH3	CH2OH	COOMe	OH	CH3	60
133	H	OH	CH2OH	CH2OH	COOMe	OH	CH3	60
134	H	OAc	CH2OAc	CH2OAc	COOMe	OH	CH3	60
135	OH	OH	CH2OH	CH3	COOH	OH	CH3	60
136	OH	OH	CH3	CH2OH	COOH	OH	CH3	59

## TRITERPENOS DA SÉRIE URSANO



SUBSTÂNCIA	R	R1	R2	R3	R4	R5	R6	R7	R8	R9	REF
137	H	OH	OH	CH3	CH2OAc	H	H	COOMe	OH	H	65
138	H	OH	OH	CH3	CH3	OH	H	COOH	OH	H	59
139	H	OH	OH	CH2OH	CH3	OH	H	COOH	OH	H	59
140	H	OAc	OAc	CH3	CH3	H	OAc	CH3	H	OH	67
141	OH	OAc	OAc	CH3	CH3	H	OAc	CH3	H	H	67
142	OH	OAc	OAc	CH3	CH3	H	OAc	CH3	H	OH	67

TABELA 1.6: DESLOCAMENTOS QUÍMICOS DE  $^{13}\text{C}$ ( $\delta\text{c}$ ) DE TRITERPENOS DO TIPO URSANO. a

TIPO	010	010	010	010	011	010	010	010	010	010	010
ESTRUTURAL	010	010	010	010	011	010	010	010	010	010	010
REFERÊNCIA	56	56	59	56	56	56	56	56	70	36	36
SUBS./CARB.	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	
C											
4	38.7	37.6	39.6	38.8	37.6	47.1	39.1	39.3b	38.4	38.2	
8	40.0	40.1	39.1	39.6	39.5	39.1	39.6	40.0b	39.7	39.5	
10	36.9	36.8	36.7	37.0	36.8	36.6	38.3	38.4	38.1	38.1	
13	139.3	139.4	138.0	138.0	138.0	137.9	138.1	138.7	138.2	137.8	
14	42.0	42.1	42.0	42.0	41.9	41.9	42.1	42.2	42.1	41.8	
17	33.7	33.8	47.9	48.1	48.0	47.9	48.1	48.3	48.0	48.1	
CH											
3	78.8	80.7	79.0	78.8	80.7	216.5*	83.8	79.2	77.1	78.8	
5	55.2	55.3	52.7	55.4	55.3	55.2	55.4	48.3	49.6	48.0	
9	47.7	47.6	47.6	47.5	47.4	46.6	47.5	47.6	47.4	47.2	
12	124.3	124.1	125.8	125.5	125.4	125.0	125.3	125.8	125.2	125.7	
18	58.9	59.0	55.3	52.8	52.8	52.8	52.8	53.2	52.8	54.7	
19	39.6	39.7b	30.6	39.1b	38.9	38.8	39.1	39.1	39.0	37.2	
20	39.6	39.7b	30.4	38.8b	38.9	38.8	38.9	38.5	38.9	152.8*	
CH2											
1	38.7	38.4	38.7	38.8	38.3	39.3	46.8	42.2	39.0	42.0	
2	27.2	23.6	23.5	27.3	23.6	33.9	68.9*	66.7*	68.3*	66.4*	
6	18.3	18.3	18.3	18.4	18.1	19.5	18.4	18.2	17.8	17.9	
7	32.9	32.8	33.0	33.0	32.8	32.4	32.9	33.0	32.6	32.6	
11	17.4	17.5	23.7	16.9	17.1	16.8	23.4	23.4	23.3	23.2	
15	28.7	28.7	29.4	28.2	28.1	27.9	28.0	28.2	28.0	27.8	
16	26.6	26.7	23.3	24.3	24.2	24.1	24.3	24.4	24.2	24.2	
21	31.2	31.3	27.3	30.7	30.7	30.5	30.7	30.8	30.6	32.1	
22	41.5	41.5	37.0	36.7	36.6	36.6	36.7	36.8	36.6	38.6	
CH3											
23	28.1	28.1	23.4	28.2	28.1	26.5	28.7	28.6	27.7	28.4	
24	15.6	16.8	17.0	15.5c	16.9	21.3b	17.0	22.0	21.6	21.7	
25	15.6	15.7	17.0	15.7c	15.5	15.1	17.0	16.5	16.3	16.3	
26	16.8	16.8	15.5	16.9	16.9	16.8	17.0	17.1	16.9	16.8	
27	23.3	23.2	24.2	23.3	23.2	23.4	23.7	23.9	23.7	23.6	
28	28.1	28.1	176.0*	177.7*	177.6*	177.3*	177.9*	178.4*	178.0*	177.2*	
29	23.3	23.2c	21.1	23.6d	23.6b	23.4c	17.0	17.1	17.0	16.0	
30	21.3	21.4c	23.4	21.2d	21.2b	21.1bc	21.2	21.2	21.2	105.0*	

a- todos os espectros foram obtidos em  $\text{CDCl}_3$  à 15.09 MHz, exceto as substâncias 109, 115 e 116 (100.00 MHz) e 114 (25.20 MHz).

b,c,d- os valores podem estar trocados dentro de uma mesma coluna.

\*- multiplicidade alterada.



TABELA 1.6: DESLOCAMENTOS QUÍMICOS DE  $^{13}\text{C}$  ( $\delta\text{C}$ ) DE TRITERPENOS DO TIPO URSANO. a

TIPO	010	010	010	010	010	010	010	010	010	010
REFERÊNCIA	36	62	64	61	65	36	65	36	36	36
SUBS./CARB.	117	118	119	120	121	122	123	124	125	126
C										
4	38.3	42.0	37.6	42.9	43.1	43.8	42.3	42.0	43.8	42.0
8	39.5	39.7	37.6	39.8	39.5	39.5	39.6	39.6	39.5	39.5
10	38.0	37.0	36.9	38.3	38.1	37.9	38.0	38.1	37.9	38.0
13	137.8	138.3	131.9	138.7	138.2	138.1	138.2	138.2	137.8	137.8
14	42.0	42.2	56.1	42.3	42.1	41.9	42.1	42.1	41.9	42.0
17	48.1	48.3	48.4	48.3	48.0	47.9	48.0	48.0	48.1	48.0
CH										
3	77.0	77.0	80.6	79.9	76.5	73.3	73.6	72.5	73.2	72.3
5	49.5	50.0	55.5	48.8	48.0	48.5	48.5	50.1	48.5	50.1
9	47.3	47.8	47.2	47.7	47.5	47.3	47.4	47.5	47.3	47.4
12	125.5	125.6	129.0	125.7	125.1	125.1	125.1	125.0	125.5	125.3
18	54.6	53.1	53.7	53.1	52.8	52.7	52.8	52.8	54.6	54.6
19	37.2	39.2b	39.4	39.3	39.0	38.9	39.0	39.1	37.1	37.1
20	152.7*	39.0b	38.8	39.1	38.8	38.7	38.8	38.8	152.7*	152.6*
CH2										
1	38.9	38.5	38.5	46.7	43.7	41.8	41.6	38.8	41.6	38.7
2	68.1*	27.0	23.6	69.0*	72.9*	66.2*	66.1*	67.9*	66.1*	67.7*
6	17.7	18.6	18.1	18.4	18.1	18.2	18.2	18.0	18.1	17.9
7	32.5	32.6	37.0	32.8	32.6	33.0	33.0	33.0	32.9	32.8
11	23.1	23.4	22.8	23.5	23.4	23.3	23.4	23.4	23.3	23.4
15	27.8	28.2	24.7	28.2	28.0	27.8	28.0	28.0	27.7	27.8
16	24.2	24.2	25.1	24.4	24.2	24.1	24.2	24.1	24.1	24.1
21	32.2	30.8	29.8	30.9	30.7	30.5	30.7	30.5	32.1	32.1
22	38.6	36.8	36.0	36.8	36.6	36.5	36.6	36.6	38.6	38.5
CH3										
23	27.7	72.3*	28.0	69.3*	68.2*	22.0	22.6	22.2	22.0	22.1
24	21.5	11.6	16.8b	13.1	12.9	65.5*	67.0*	66.2*	65.7*	66.1*
25	16.2	16.0	16.3b	17.1	17.0	16.7	17.0	16.8	16.7	16.7
26	16.8	17.2	18.3	17.1	17.0	16.7	16.8	16.8	16.6	16.6
27	23.5	23.8	175.2*	23.9	23.6	23.6	23.7	23.7	23.5	23.5
28	177.2*	178.2*	177.6*	178.4*	178.0*	178.0*	178.0*	177.9*	177.2*	177.1*
29	16.0	17.2	17.1	17.3	17.0	16.9	16.8	17.0	16.0	16.0
30	105.0*	21.3	21.0	21.2	21.1	21.1	20.9	21.2	105.0*	105.0*

a- todos os espectros foram obtidos em  $\text{CDCl}_3$  à 25.0 MHz (118-120) e 75.2 MHz (122, 125 e 126), exceto as substâncias 124 (100.0 MHz) e 117, 121 e 123 (?).

b- os valores podem estar trocados dentro de uma mesma coluna.

\*- multiplicidade alterada.

TABELA 1.6: DESLOCAMENTOS QUÍMICOS DE  $^{13}\text{C}$  ( $\delta\text{C}$ ) DE TRITERPENOS DO TIPO URSANO. a

TIPO	010	010	010	010	010	010	010	010	010	010
ESTRUTURAL	010	010	010	010	010	010	010	010	010	010
REFERENCIA	59	59	60	60	60	60	60	60	66	59
	60									
SUBS./CARB.	127	128	129	130	131	132	133	134	135	136
C										
4	38.5	37.6	41.8	40.6	42.7	40.2	45.3	43.0	--	42.5
8	39.9	39.9	39.9	40.0	40.0	40.2	39.8	39.9	--	40.8
10	36.9	36.9	36.9	36.8	36.8	36.8	36.6	36.7	--	39.2
13	138.0	138.0	138.0	138.2	137.9	138.1	138.0	138.0	139.6	138.2
14	41.1	41.1	41.1	41.2	41.1	41.2	41.2	41.1	--	41.1
17	47.9	47.9	47.9	47.9	47.9	47.9	47.9	47.9	--	47.7
CH										
3	79.0	80.9	76.9	74.6	70.6	73.4	67.0	70.3	78.1	84.2
5	55.2	55.2	49.8	47.9	49.5	50.7	46.4	47.9	--	53.3
9	47.2	47.1	47.2	47.3	47.1	47.2	46.9	47.3	--	46.8
12	129.1	129.0	129.1	129.0	129.1	129.0	128.9	128.7	127.6	127.2
18	53.2	53.3	53.2	53.3	53.2	53.3	53.3	53.3	54.4	55.3
19	73.1*	73.0*	73.1*	73.2*	73.1*	73.2*	73.1*	73.1*	72.5*	71.9
20	41.1	41.1	41.1	41.2	41.1	41.2	41.1	41.1	--	41.3
CH2										
1	38.7	38.1	38.1	37.9	33.1	33.4	32.7	33.2	--	46.1
2	27.4	23.6	26.8	23.0	25.2	22.5	24.6	22.4	68.7*	67.7*
6	18.4	18.3	18.6	18.1	18.7	18.4	18.4	18.4	--	18.0
7	32.8	32.7	32.5	32.5	32.9	32.9	32.7	32.8	--	32.6
11	23.7	23.6	23.7	23.7	23.7	23.7	23.8	23.7	--	24.9
15	28.1	28.2	28.2	28.3	28.2	28.3	23.2	28.2	--	28.6
16	25.5b	25.5b	25.5b	25.5b	25.5b	25.5b	25.5b	25.5b	--	25.4
21	26.0b	26.0b	26.0b	26.1b	26.0b	26.1b	26.0b	26.0b	--	27.7
22	37.4	37.4	37.4	37.4	37.4	37.4	37.5	37.4	--	37.2
CH3										
23	28.1	28.2	72.1*	65.5*	21.6	22.1	70.3*	64.3*	66.4*	22.9
24	15.2c	16.7c	11.3	13.1	66.5*	66.7*	66.0*	67.2*	--	64.2*
25	15.5c	15.3	15.6	15.8	15.6	15.5	14.9	15.2	--	21.8
26	16.6d	16.7c	16.6c	16.7c	16.5c	16.5c	16.6	16.5c	--	14.6
27	24.5	24.5	24.5	24.4	24.6	24.6	24.6	24.4	--	22.3
28	178.3*	178.2*	178.3*	178.3*	178.2*	178.3*	178.5*	178.2*	180.2*	180.7*
29	27.2	27.4	27.4	27.5	27.4	27.5	27.4	27.4	--	23.0
30	16.1d	16.1c	16.1c	16.1c	16.1c	16.1c	16.1	16.1c	--	15.7

a- todos os espectros foram obtidos à 25.15 MHz, exceto a substância 130 (100.63 MHz).

b,c,d- os valores podem estar trocados dentro de uma mesma coluna.

\*- multiplicidade alterada.

TABELA 1.6: DESLOCAMENTOS QUÍMICOS DE  $^{13}\text{C}$  ( $\delta_{\text{C}}$ ) DE TRITERPENOS DO TIPO URSANO. a

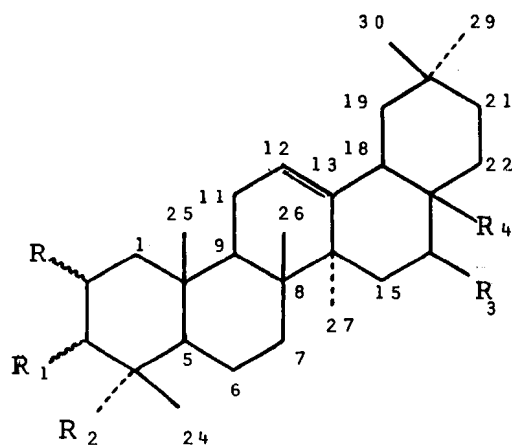
TIPO						
ESTRUTURAL	010	010	010	010	010	010
REFERÊNCIA	65	59	59	67	67	67
SUBS./CARB.	137	138	139	140	141	142
C						
4	42.3	41.2	42.8	38.7b	38.7	38.7
8	40.0	39.2	38.3	42.0	41.6	41.6
10	38.0	38.4	36.7	39.2b	43.7	43.7
13	138.1	137.5	138.5	144.7	145.1	144.6
14	41.2	41.2	41.4	43.1	43.4	43.4
17	47.9	47.9	47.9	32.9	33.1	31.9
CH						
3	73.6	82.9	76.6	80.3	80.1	80.1
5	48.4	53.3	47.2	54.6	54.0	54.0
9	47.0	47.4	47.1	52.4c	51.7	51.9b
12	128.6	127.6	126.7	123.8	123.3	123.7
18	53.2	55.3	54.0	51.6c	57.3	51.7b
19	73.0*	71.8*	72.4*	40.1	39.3b	40.5
20	41.4	41.1	41.1	71.2*	39.7b	71.3*
CH2						
1	45.5	48.4	48.2	45.0	77.4**	77.5*
2	66.0*	67.7*	67.8*	69.7*	74.3*	74.3*
6	18.3	27.7	27.9	18.1	18.0	18.0
7	32.8	66.9*	67.0*	33.0	32.0	32.6
11	23.8	22.8	23.8	71.0*	71.0*	70.9
15	28.0	28.7	28.7	27.1	27.8	27.2
16	25.4	25.4	25.5	26.6	27.1	26.9
21	26.0	24.8	25.3	35.8d	31.1	35.8c
22	37.4	37.1	37.7	35.5d	41.2	35.4c
CH3						
23	22.6	25.2	64.5*	28.3	28.0	28.0
24	67.1*	16.6	17.1	17.5	16.8	16.8
25	16.5	16.8	22.3	18.0e	15.4	15.4
26	16.6	16.6	14.8	18.1e	18.3	18.3
27	24.5	27.0	25.9	22.3	22.2	22.1
28	178.3*	180.6*	178.4*	28.4	28.7	28.3
29	27.3	22.9	23.0	12.2	16.8	12.1
30	16.1	14.6	13.0	30.1	21.4b	30.1

a- todos os espectros foram obtidos à 75.4 MHz , exceto as substâncias 138 e 139 (100.63 MHz).

b,c,d,e- os valores podem estar trocados dentro de uma mesma coluna.

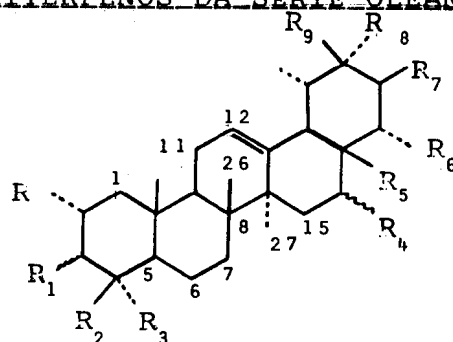
\*- multiplicidade alterada.

TRITERPENOS DA SÉRIE OLEANANO



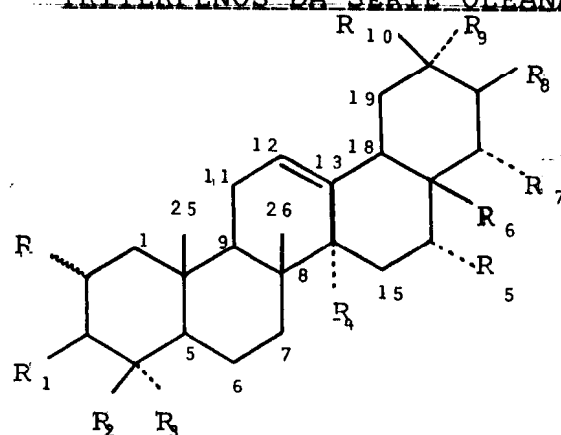
SUBSTÂNCIA	R	R1	R2	R3	R4	REF.
143	H	$\beta$ OH	CH3	H	CH3	56, 68
144	H	$\beta$ OAc	CH3	H	CH3	56
145	H	$\beta$ OH	CH3	H	COOMe	69, 71
146	H	$\beta$ OAc	CH3	H	COOH	74
147	H	$\beta$ OAc	CH3	H	COOMe	72, 73
148	$\alpha$ OH	$\beta$ OH	CH3	H	COOMe	56, 70
149	$\beta$ OH	$\beta$ OH	CH2OH	H	COOMe	75
150	H	$\beta$ OH	CH2OH	H	COOMe	62, 71
151	H	$\beta$ OAc	CH2OH	H	COOMe	73
152	$\alpha$ OH	$\alpha$ OH	CH3	H	COOMe	56
153	H	$\beta$ OH	CH2OH	H	CH2OH	73, 76
154	H	$\beta$ OAc	CH2OAc	H	CH2OAc	73
155	H	$\beta$ OH	CHO	H	COOMe	73
156	H	$\beta$ OAc	CHO	H	COOMe	73
157	H	$\beta$ OH	CH3	-OH	CH2OH	76

## TRITERPENOS DA SÉRIE OLEANANO



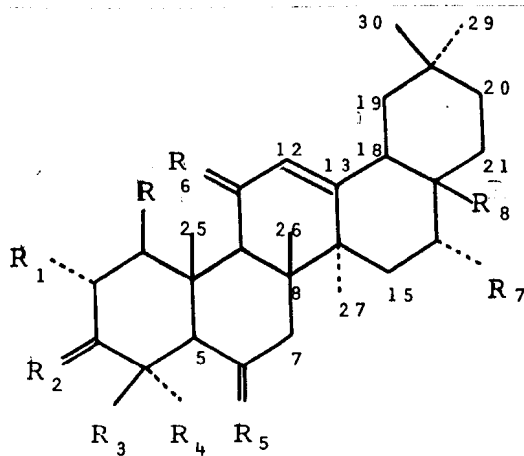
SUBSTANCIA	R	R1	R2	R3	R4	R5	R6	R7	R8	R9	REF.
158	H	OAc	CH3	CH3	$\beta$ OAc	CH2OAc	H	H	CH3	CH3	76
159	H	OH	CH3	CH3	H	COOMe	H	H	CH2OH	CH3	69,73
160	H	OAc	CH3	CH3	H	COOMe	H	H	CH3	CH2OAc	73
161	H	OH	CH3	CH3	H	COOMe	H	H	CH3	CH2OH	69,71
162	H	OH	CH3	CH3	H	COOH	H	A*	CH3	CH3	72
163	H	OH	CH3	CH3	H	CH2OH	OH	H	CH3	CH3	73
164	H	OAc	CH3	CH3	H	CH2OAc	OAc	H	CH3	CH3	73
165	OH	OH	CH3	CH2OH	H	COOMe	H	H	CH3	CH3	61
166	OH	OH	CH2OH	CH3	H	COOMe	H	H	CH3	CH3	36,70
167	OAc	OAc	CH2OAc	CH3	H	COOMe	H	H	CH3	CH3	36
168	H	OH	CH3	CH2OH	$\beta$ OH	CH2OH	H	H	CH3	CH3	76
169	H	OAc	CH3	CH2OAc	$\beta$ OAc	CH2OAc	H	H	CH3	CH3	76
170	H	OH	CH3	CHO	$\alpha$ OH	COOMe	H	H	CH3	CH3	73
171	H	OAc	CH3	CHO	$\alpha$ OAc	COOMe	H	H	CH3	CH3	73

TRITERPENOS DA SÉRIE OLEANANO



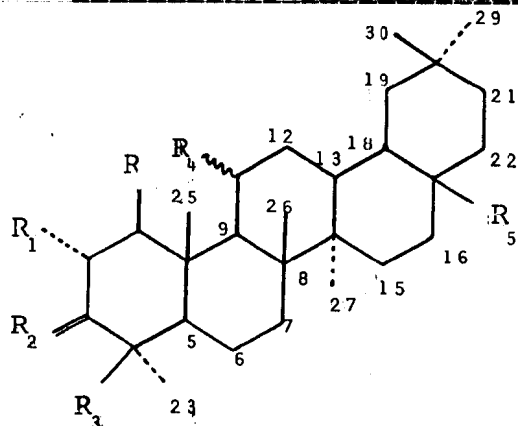
SUBSTÂNCIA	R	R1	R2	R3	R4	R5	R6	R7	R8	R9	R10	REF
172	$\alpha$ OH	OH	CH3	CH3	CH3	H	COOH	H	H	CH3	OH	72
173	H	OH	CH3	COOH	CH3	H	COOH	H	H	CH2OH	H	71
174	H	OH	CH3	CH3	CH3	OH	COOH	H	B*	CH3	H	77
175	$\beta$ OH	OH	CH3	COOH	CH2OH	H	COOH	H	H	CH3	H	71
176	$\alpha$ OH	OH	CH2OH	CH3	CH3	H	COOMe	H	H	CH3	OH	70
177	$\alpha$ OH	OH	COOMe	CH3	CH3	H	COOMe	H	H	CH3	OH	70
178	H	OH	CH3	CH2OH	CH2OH	H	COOH	H	H	CH2OH	H	71
179	H	OAc	CH3	CH2OAc	CH2OAc	H	COOH	H	H	CH2OAc	H	71
180	H	OH	CH3	CH2OH	CH3	OH	CH2OH	OH	H	CH3	H	76
181	H	OAc	CH3	CH2OAc	CH3	OAc	CH2OAc	OAc	H	CH3	H	76

## TRITERPENOS DA SÉRIE OLEANANO



SUBSTÂNCIA	R	R1	R2	R3	R4	R5	R6	R7	R8	$\Delta$	REF
182	H	H	O	CH3	CH3	H2	H2	H	COOMe	-	56
183	H	H	$\beta$ OH, $\alpha$ H	CH3	CH2OH	H2	H2	OH	CH2OH	-	76,78
184	H	H	$\beta$ OAc, $\alpha$ H	CH3	CH3	H2	O	H	CH3	-	68
185	H	H	$\beta$ OAc, $\alpha$ H	CH3	CH2OAc	H2	H2	OAc	CH2OAc	-	76,78
186	H	H	$\beta$ OAc, $\alpha$ H	CH3	CH3	H2	H2	H	CH3	9	79
187	OH	OH	$\beta$ OAc, $\alpha$ H	CH3	CH3	H2	H2	H	CH3	9	67
188	H	H	O	CH3	CH3	H2	H2	H	CH3	9	68
189	H	H	$\beta$ OAc, $\alpha$ H	CH3	CH3	O	H2	H	CH3	9	79

TRITERPENOS DA SERIE OLEANANO



SUBSTANCIA	R	R1	R2	R3	R4	R5	$\Delta$	REF
190	H	OH	$\alpha$ OH, $\beta$ H	CH <sub>2</sub> OH	H	COOMe	11;13(18)	56
191	H	OAc	$\alpha$ OAc, $\beta$ H	CH <sub>2</sub> OAc	H	COOMe	11;13(18)	76,78
192	OH	H	O	CH <sub>3</sub>	$\alpha$ OH, $\beta$ H	CH <sub>3</sub>	18(19)	68



TABELA 1.7: DESLOCAMENTOS QUÍMICOS DE  $^{13}\text{C}$  ( $\delta\text{c}$ ) DE TRITERPENOS DO TIPO OLEANANO. a

TIPO	070	070	070	070	070	070	070	070	070	070
ESTRUTURAL	070	070	070	070	070	070	070	070	070	070
REFERÊNCIA	56	56	69	74	72	56	75	62	73	56
	68		71		73	70		71		
SUBS./CARB.	143	144	145	146	147	148	149	150	151	152
C										
4	38.8	37.6	38.7	37.7	37.5	39.1	42.4	42.0	40.6	38.5b
8	38.8	39.7	39.4	39.2	39.3	39.1	39.7	39.5	39.3	39.7b
10	37.0	36.8	37.0	36.9	36.9	38.3	37.1	37.1	36.8	38.3b
13	145.1	144.9	143.4	143.5	143.6	143.6	144.1	143.9	143.6	143.8
14	41.8	41.7	41.6	41.5	41.6	41.7	42.0	41.8	41.6	41.9
17	32.5	32.5	46.6	46.5	46.6	46.6	46.9	46.9	46.6	46.8
20	31.1	31.1	30.6	30.7	30.6	30.7	30.8	30.8	30.6	30.7
CH										
3	79.0	80.7	78.7	80.8	80.7	83.8	72.9	77.0	74.3	78.9
5	55.3	55.3	55.2	55.2	55.2	55.3	48.0	50.0	47.7	48.1
9	47.7	47.6	47.6	47.6	47.5	47.5	48.4	47.8	47.7	47.4
12	121.8	121.5	122.1	122.5	122.1	122.0	123.1	122.4	122.0	122.1
18	47.4	47.2	41.3	40.8	41.1	41.3	41.8	41.5	41.3	41.3
CH2										
1	38.7	38.2	38.5	38.0	38.1	46.4	44.8	38.3	37.7	41.7
2	27.3	23.6	27.1	28.5	23.6	68.8*	71.5*	27.0	23.0	66.5*
6	18.4	18.3	18.3	18.1	18.2	18.3	18.2	18.7	18.1	18.1
7	32.8	32.6	32.6	32.4	32.6	32.6	32.8	32.6	32.3	32.5
11	23.6	23.4	23.1	22.8	23.0	23.5	23.9	23.5	23.0	23.4
15	26.2	28.3	27.7	27.6	27.7	27.6	28.0	27.9	27.7	27.7
16	27.0	26.2	23.4	23.5	23.6	23.1	23.3	23.2	23.4	23.2
19	46.9	46.8	45.8	45.4	45.8	45.8	46.0	46.1	45.8	46.0
21	34.8	34.8	33.8	33.7	33.3	33.8	33.9	34.0	33.8	34.0
22	37.2	37.1	32.3	32.4	32.3	32.3	32.8	32.5	32.3	32.5
CH3										
23	28.2	28.1	28.1	28.0	28.0	28.6	67.5*	72.3*	65.3*	28.5
24	15.5	16.8	15.6	16.6	16.8	16.8	14.6	11.5	13.1	21.9
25	15.6	15.7	15.3	17.2	15.3	16.8	17.2	15.8	15.8	16.4
26	16.9	16.8	16.8	16.6	16.8	16.8	17.2	17.0	16.8	17.0
27	26.0	26.0	26.0	25.9	25.8	26.0	26.2	26.1	25.8	26.2
28	28.4	27.0	177.9*	184.2*	177.8*	178.0*	177.9*	178.4*	177.8*	178.1*
29	33.3	33.4	33.1	33.6	33.1	33.1	33.1	33.2	33.1	33.2
30	23.7	23.6	23.6	23.5	23.6	23.5	23.6	23.8	23.6	23.6

a- todos os espectros foram obtidos em  $\text{CDCl}_3$  à 15.09 MHz, exceto as substâncias 145 (100.60 MHz), 146 e 149 (?), 147 e 150 (25.20 MHz) e 148 (67.50 MHz).

b- os valores podem ser trocados dentro de uma mesma coluna.

\*- multiplicidade alterada.

TABELA 1.7: DESLOCAMENTOS QUÍMICOS DE  $^{13}\text{C}$  ( $\delta\text{C}$ ) DE TRITERPENOS DO TIPO OLEANANO. a

TIPO	070	070	070	070	070	070	070	070	070	070
ESTRUTURAL	070	070	070	070	070	070	070	070	070	070
REFERÊNCIA	73 76	73	73	73	76	76	69 73	73	69 71	72
SUBS./CARB.	153	154	155	156	157	158	159	160	161	162
C										
4	41.8	40.6	55.2	54.2	38.8	37.7	38.8	37.7	38.7	38.8
8	39.8	39.8	39.6	39.5	39.9b	39.7b	39.3	39.3	39.3	39.2
10	36.9	36.7	36.0	35.7	36.9	36.8	37.1	36.9	37.2	37.9
13	144.2	143.6	143.6	143.6	142.8	141.8	143.2	142.9	143.2	142.8
14	41.8	41.6	41.7	41.5	43.7	43.4	41.6	41.4	41.7	41.7
17	36.9	35.8	46.6	46.5	40.0b	40.0b	47.0	46.4	46.8	47.9
20	31.0	30.9	30.7	30.5	30.8	30.7	35.8	33.7	35.2	35.3
CH										
3	76.7	74.6	71.8	73.2	78.9	80.8	79.1	80.7	78.9	78.5
5	49.8	47.9b	48.0	47.7	55.3	55.2	55.3	55.2	55.3	55.2
9	47.6	47.7b	47.5	47.5	46.8	46.7	47.7	47.5	47.7	47.6
12	122.3	122.6	121.9	121.7	122.6	123.6	122.8	122.7	122.8	122.6
18	42.4	42.6	41.3	41.2	44.7	43.2	40.5	40.7	40.3	40.7
CH2										
1	38.3	37.9	38.0	37.7	38.8	38.3	38.5	38.1	38.7	38.5
2	26.0	23.0	26.0	22.5	26.9	23.5	27.2	23.4	27.0	27.2
6	18.5	18.0	20.7	20.3	18.4	18.1	18.4	18.2	18.5	18.4
7	32.4	32.2	32.3	32.2	32.6	32.6	32.7	32.6	32.8	32.8
11	23.6	23.6	23.0	22.8	23.6	23.5	23.1	23.4	23.4	23.4
15	25.6	25.6	27.6	27.6	35.8	31.7	27.7	27.5	27.7	27.8
16	22.0	22.2	23.3	23.2	67.7*	68.7*	23.5	23.4	23.4	24.4
19	46.5	46.2	45.8	45.7	46.7	46.2	40.1	41.4	40.3	46.6
21	34.1	34.0	33.8	33.7	33.6	33.7	31.6	29.3b	32.8b	75.6*
22	31.0	31.4	32.1	31.9	26.2	23.5	32.7	31.7b	32.1b	36.8
CH3										
23	72.0*	65.4*	207.0*	204.0*	28.1	28.0	28.1	28.0	28.1	28.1
24	11.4	13.1	8.9	9.5	15.6	16.7c	15.6	16.7	15.7	15.7b
25	15.9	16.0	15.5	15.5	15.6	15.6	15.3	15.4	15.4	15.3b
26	16.8	16.7	16.8	16.7	16.7	16.8c	16.9	16.7	16.9	16.9
27	26.8	25.8	26.0	25.8	26.9	26.9	25.9	25.9	26.0	25.7
28	69.7*	70.7*	177.9*	177.7*	70.9*	66.4*	178.1*	177.4*	178.5*	178.7*
29	32.2	33.1	33.1	33.0	33.2	32.9	74.4*	27.8	28.9	28.8
30	23.6	23.6	23.6	23.5	23.9	23.5	19.0	67.7*	65.8*	18.4

a- todos os espectros foram obtidos em  $\text{CDCl}_3$  à 15.09 MHz, exceto as substâncias 159 e 161 (100.60 MHz) e 162 (25.20 MHz).

b- os valores podem estar trocados dentro de uma mesma coluna.

\*- multiplicidade alterada.

TABELA 1.7: DESLOCAMENTOS QUÍMICOS DE  $^{13}\text{C}$  ( $\delta\text{C}$ ) DE TRITERPENOS DO TIPO  
OLEANANO. a

TIPO	070	070	070	070	070	070	070	070	070	070
ESTRUTURAL	070	070	070	070	070	070	070	070	070	070
REFERÊNCIA	73	73	61	36	36	76	76	73	73	72
				70						
SUBS./CARB.	163	164	165	166	167	168	169	170	171	172
C										
4	39.0	37.7	41.1	41.4	41.6	42.0	40.6	55.2	54.2	38.8
8	40.2	40.0	39.7	39.3	39.3	40.0b	39.8b	39.7	39.7	38.9
10	37.1	36.8	38.2	38.0	38.1	37.0	36.6	35.9	35.8	38.5
13	143.2	141.9	144.4	143.7	143.8	143.0	141.9	142.8	141.9	143.4
14	41.5	41.7	42.0	41.6	42.0	43.9	43.3	41.4	41.0	41.9
17	43.0	40.1	47.0	46.6	46.5	40.4b	40.0b	48.7	47.5	46.6
20	31.5	31.5	30.8	30.6	30.6	30.9	30.7	30.3	30.3	36.9
CH										
3	78.8	80.7	78.8	73.3	72.4	76.5	74.4	71.7	73.2	82.2
5	55.6	55.2	42.6	48.6	50.1	49.9	47.9	48.1	47.9	54.8
9	47.9	47.5	47.7	47.4	47.5	47.0	46.9	46.7	46.6	47.2
12	123.0	123.8	122.4	121.9	121.8	122.7	123.5	122.2	123.0	122.6
18	42.4	41.9	41.6	41.1	41.1	44.9	43.3	40.5	40.3	43.1
CH2										
1	39.0	38.3	41.7	41.4	38.5	38.5	38.0	38.1	37.8	47.2
2	27.0	23.6	66.7*	66.2*	67.7*	26.7	23.0	26.0	22.5	67.1*
6	18.6	18.2	18.0	18.2	18.0	18.7	17.9	20.7	20.3	16.9
7	32.8	32.5	32.6	32.7	32.5	32.6	32.3	32.3	32.3	32.4
11	23.8	23.6	23.2	23.4	23.5	23.7	23.6	23.2	23.2	23.2
15	25.3	25.0	27.9	27.5	27.5	36.2	31.6	35.4	32.3	28.4
16	14.7	16.7	23.6	22.9	22.9	68.0*	68.7*	74.7*	76.0*	24.0
19	46.0	44.1	46.2	45.7	45.8	47.0	46.3	46.4	46.1	80.0*
21	42.4	38.9	34.1	33.7	33.7	33.7	33.7	35.4	35.0	28.4
22	75.8*	71.7*	32.4	32.2	32.2	26.2	23.6	30.3	30.9	34.8
CH3										
23	28.2	28.0	71.5*	22.0	22.1	71.7*	65.3*	207.0*	204.0*	27.1
24	15.6	16.7	17.5	65.5*	66.1*	11.6	13.1	9.0	9.5	16.8
25	15.6	15.5	16.8	16.6	16.6	16.0	16.0	15.7	15.6	16.1
26	16.7	16.7	17.1	16.6	16.7	16.9	16.9	16.9	16.8	16.9
27	26.4	26.2	26.2	25.9	25.9	26.9	26.9	27.0	26.4	28.7
28	70.1*	66.0*	178.7*	178.2*	178.1*	71.1*	66.4*	177.2*	175.6*	179.0*
29	33.4	33.0	33.2	33.0	33.0	33.1	32.9	32.7	33.1	28.7
30	24.8	24.3	23.8	23.5	23.5	24.0	23.6	24.6	24.2	24.4

a- todos os espectros foram obtidos em  $\text{CDCl}_3$  à 15.09 MHz, exceto as substâncias 165 e 172 (25.20 MHz) e 166 e 167 (75.20 MHz).

b- os valores podem estar trocados dentro de uma mesma coluna.

\*- multiplicidade alterada.

TABELA 1.7: DESLOCAMENTOS QUÍMICOS DE  $^{13}\text{C}$  ( $\delta\text{c}$ ) DE TRITERPENOS DO TIPO OLEANANO. a

TIPO	070	070	070	070	070	070	070	070	070	070
REFERÊNCIA	71	77	71	70	70	71	71	76	76	56
SUBS./CARB.	173	174	175	176	177	178	179	180	181	182
C										
4	53.0	39.6	54.0	48.9	58.5	42.7	40.6	41.8	40.6	40.7
8	38.7	40.2	40.9	39.8	39.3	40.4	39.9	39.8	39.8	39.1
10	35.2	38.0	37.1	38.0	37.5	37.4	37.0	36.9	36.6	36.6
13	143.6	143.2	139.7	143.1	143.7	140.1	136.6	142.7	140.4	143.5
14	40.7	42.2	46.5	41.8	42.0	46.9	45.2b	41.8	41.0	41.7
17	45.7	51.2	48.1	46.2	46.7	48.0	46.3b	43.9	41.7	46.7
20	35.5	30.0	31.0	28.3	28.2	36.6	34.4	31.4	31.2	30.5
CH										
3	74.1	78.4	75.8	81.9	80.9	73.7	74.4	76.0	74.2	216.8*
5	50.4	56.4	52.3	56.2	56.3	49.0b	47.9	49.3	47.9	55.2
9	46.9	48.4	49.5	48.1	47.7	48.8b	48.7	46.7	46.7	46.7
12	?	121.6	127.6	124.7	124.6	127.7	127.7	122.9	124.9	121.9
18	39.9	40.8	41.8	41.5	41.5	41.2	39.9	42.4	41.4	41.2
CH <sub>2</sub>										
1	37.6	39.2	45.0	38.4	38.4	38.6	37.9	38.5	38.0	39.1
2	26.2	27.6	71.6*	69.1*	69.8*	27.6	23.3	26.3	23.0	34.2
6	20.2	18.0	21.6	18.4	18.4	18.7	18.0	18.4	17.8	19.5
7	31.6	30.4	34.1	32.6	32.6	33.4	32.8	32.6	32.4	32.1
11	22.4	24.0	24.0b	23.1	23.8	24.1	22.9	23.5	23.5	23.0
15	26.9	35.6	24.7b	27.7	27.7	24.4	22.8	33.4	30.6	27.6
16	22.4	74.4*	24.1b	23.5	23.5	23.8	23.8	67.9*	70.8*	23.5
19	39.9	47.6	45.5	82.2*	81.9*	40.4	39.1	47.2	46.7	45.7
21	27.7	79.4*	33.5	34.8	34.0	28.9	28.3	44.8	41.4	33.7
22	31.2	37.2	33.2	32.9	32.7	32.7	31.4	75.5*	72.1*	32.1
CH <sub>3</sub>										
23	179.7*	28.2	180.8*	28.1	28.3	68.8*	65.2*	70.8*	65.2*	26.4
24	10.9	16.4	13.7	65.6*	185.2*	12.9	13.1	11.7	13.1	21.3
25	14.6	14.3	17.5	16.9	14.2	16.3	16.0	16.0	16.0	14.8
26	15.9	17.2	18.8	17.1	16.7	18.8	18.3	16.8	16.7	16.7
27	24.8	27.6	64.4*	25.0	24.8	64.4*	65.6*	27.0	26.5	25.7
28	178.9*	181.0*	180.8*	178.6*	178.5*	180.3*	? *	71.1*	67.7*	177.7*
29	72.4*	34.0	33.2	32.9	32.9	74.0*	74.1*	33.2	33.1	33.0
30	18.3	20.5	23.2	23.6	51.3	19.8	19.3	24.9	24.5	23.5

a- todos os espectros foram obtidos em CDC13 (exceto as substâncias 173,175 e 178: C<sub>5</sub>D<sub>5</sub>N) à 25.20 MHz (173-175), 67.50 MHz (176-177), 90.50 MHz (178-179) e 15.09 (180-182).

b- os valores podem estar trocados dentro de uma mesma coluna.

\*- multiplicidade alterada.

TABELA 1.7: DESLOCAMENTOS QUÍMICOS DE  $^{13}\text{C}$  ( $\delta\text{c}$ ) DE TRITERPENOS DO TIPO OLEANANO. a

TIPO	070	070	070	070	070	070	070	070	070	070
ESTRUTURAL	070	070	070	070	070	070	070	070	070	070
REFERÊNCIA	76 78	68	76 78	79	67	68	79	36	36	37
SUBS./CARB.	183	184	185	186	187	188	189	190	191	192
C										
4	41.9	38.0	40.6b	37.9	38.7	47.2	36.9	44.0	42.0	47.2
8	40.0	43.3	39.8	38.6b	40.8	40.6	41.2	40.9	40.8	42.6b
10	36.9	36.9	36.7	40.7b	42.8b	38.1	47.6	37.7	37.7	43.9b
13	143.1	170.2	141.8	147.2	147.4	147.2	148.9	136.3	136.0	37.3*
14	41.6	45.3	41.1b	42.7	44.6b	42.9	42.8	42.1	42.0	42.9b
17	40.6	32.3	37.8	32.1	32.1	32.1	32.3	48.2	48.3	34.3
20	30.4	31.0	30.6	31.1	31.1	31.6	31.2	32.5	32.0	32.4
CH										
3	76.7	80.5	74.4	80.6	80.8c	217.3*	80.1	73.5	72.4	216.5*
5	49.9	54.9	48.0	51.2	45.5	51.7	59.9	48.4	49.7	50.9
9	47.0	61.5	46.9	153.9*	151.2*	152.1*	149.6*	54.2	54.1	55.9
12	122.6	127.9	123.9	120.7	121.2	120.4	120.9	126.2	125.9	37.1*
18	42.8	47.5	42.1	45.6	48.8	45.6	45.9	132.0*	132.4*	141.2*
CH2										
1	38.4	38.7	37.8	37.1	80.9*c	37.0b	37.1	41.4	38.3	78.9*
2	26.4	23.4	23.0	24.3	72.6*	34.5	23.8	66.2*	67.5*	43.1
6	18.5	18.4	17.9	18.2	18.1	19.1	211.9*	18.3	18.0	19.4
7	32.6	32.6	32.5	32.1	31.4	31.2	48.5	32.6	32.4	33.2
11	23.4	201.4*	23.5	115.9*	118.9*	117.3*	116.6*	125.7*	125.4*	70.0*
15	34.7	26.4	30.9	25.6	27.2d	27.2	25.7	32.7	32.6	27.4
16	74.9*	26.4	75.9*	27.2	25.7d	25.6	27.1	24.9	24.9	37.2
19	47.0	45.0	47.1	46.8	46.7	46.8	46.7	40.6	40.4	130.1*
21	35.4	34.4	35.6	34.6	34.6	34.5	34.6	36.9	36.7	33.9
22	26.8	36.4	29.7	36.9	37.0	37.7	36.9	35.5	35.4	37.4
CH3										
23	71.9*	28.0	65.4*	28.7	28.3	26.8	28.7	22.1	22.1	28.9
24	11.5	16.6	13.1	16.8	17.2	21.2	16.4	65.2*	65.8*	19.3
25	16.1	15.7	16.1	20.0c	20.0e	20.5	19.3	19.2	19.0	14.1b
26	17.2	17.3	16.8	21.0c	20.3e	19.9	20.8	16.2	16.1	17.4
27	27.3	23.5	26.5	28.1	21.7e	25.2	27.9	19.9	19.8	14.2b
28	70.8*	28.7	71.4*	25.3	28.7	28.7	25.5	177.1*	176.9*	25.2
29	32.8	33.0	32.1	33.2	33.2	33.1	33.2	24.1	24.0	31.3
30	25.5	23.5	24.2	23.7	23.7	23.6	23.3	32.2	32.3	29.1

a- todos os espectros foram obtidos em  $\text{CDCl}_3$  a 15.09 MHz (183,185-186), 25.20 MHz (184 e 188), 90.00 MHz (189) e 100.00 MHz (190-191).

b,c,d,e- os valores podem estar trocados dentro de uma mesma coluna.

\*- multiplicidade alterada.

#- atribuições confirmadas por dupla ressonância.

TABELA 2: PADRÕES DE MULTIPLICIDADE DE TRITERPENOS PENTACÍCLICOS.

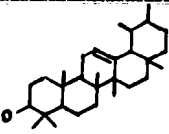
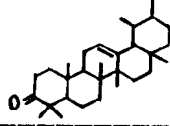
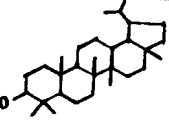
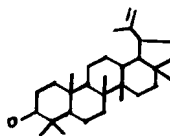
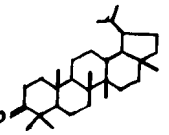
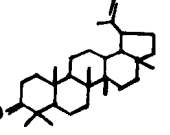
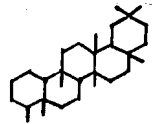
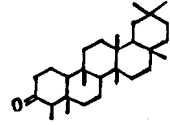
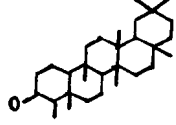
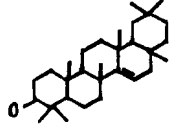
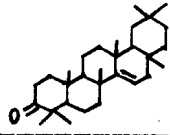
TIPO	CÓDIGO	PADRÃO	MULTIPLICIDADES			
			C	CH	CH2	CH3
URSANO	010		6	7	9	8
	011		6	6	10	8
LUPANO	020		5	7	10	8
	021		6	6	11	7
	022		5	6	11	8
	023		6	5	12	7
FRIEDELANO	030		6	4	12	8
	031		7	4	11	8
	032		6	5	11	8
TARAXERANO	040		7	5	10	8
	041		7	4	11	8

TABELA 2: PADRÕES DE MULTIPLICIDADE DE TRITERPENOS PENTACÍCLICOS.

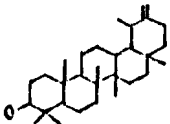
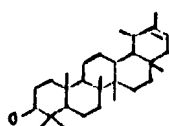
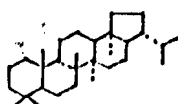
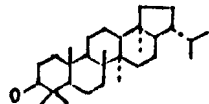
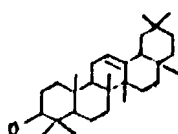
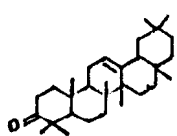
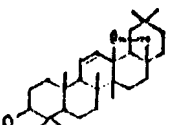
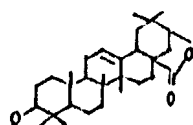
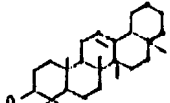
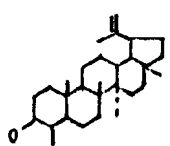
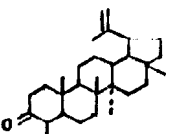
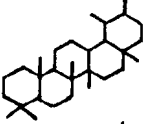
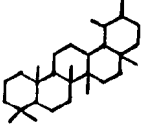
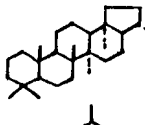
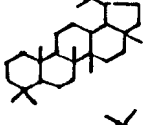
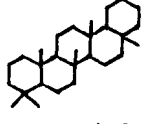
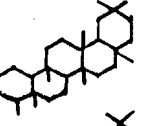
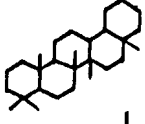
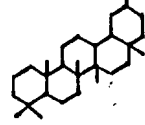
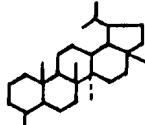
TIPO	CÓDIGO	PADRÃO	MULTIPLICIDADES			
			C	CH	CH2	CH3
TARAXASTERANO	050		6	6	11	7
	051		6	7	9	8
HOPANO	060		5	6	11	8
	061		5	7	10	8
OLEANANO	070		7	5	10	8
	071		8	4	10	8
	072		7	6	10	7
	073		8	6	9	7
NOR-OLEANANO	080		6	6	10	7
NOR-LUPANO	090		4	7	11	7
	091		5	6	11	7

TABELA 3. PADRÕES DE MULTIPLICIDADES DE TRITERPENOS PENTACÍCLICOS TOTALMENTE DESFUNCIONALIZADOS.

TIPO	C	CH	CH <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub>	ESQUELETO
URSANO	5	6	11	8	
TARAXASTERANO	5	6	11	8	
HOPANO	5	6	11	8	
LUPANO	5	6	11	8	
TARAXERANO	6	4	12	8	
FRIEDELANO	6	4	12	8	
OLEANANO	6	4	12	8	
NOR-OLEANANO	5	5	12	7	
NOR-LUPANO	4	7	11	7	



## VI. BIBLIOGRAFIA

1. Bremser, W. e col., 1975, Organic Magnetic Res., Z, 97- 106.
2. Djerassi, C. e col., 1982, Pure & Appl. Chem., 54 (12), 2425-2442.
3. Gray, N.A.B. e col., 1981, J. Org. Chem., 46 , 703-715.
4. Gastmans, J.P. e col., 1988, Anal. Chem. Acta, no prelo.
5. Furlan, M. e col., 1988, Magn. Res. Chem., no prelo.
6. Geissman, T.A., 1969, Organic Chemistry of Secondary Plant Metabolism, Cooper e Co., San Francisco.
7. Luckner, M., 1972, Secondary metabolism in plants and animals. Academic Press, N.Y..
8. Torssell, K.B.G., 1983, Natural Product Chemistry."A Mechanistic and Biosynthetic approach to secondary metabolism, John Wiley & Sons Lim., N.Y.
9. Lobo, A.M., 1976, Biossintese de Produtos Naturais- Metabolismo Secundario. Universidade Nova Lisboa, Lisboa.
10. Dosseh, C.; Moretti, C.; 1980, Plant Med. Phytother. 14 (3), 136-142.
11. Devon, M.; Scot, S., 1969, Handbook of naturally occurring compounds Academic Press, N.Y.
12. Jelinski, L.W., 1984, Chem. & Engen. News, nov. 5, 26-47
13. Benn, R. e Gunther, H., 1983, Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 22, 350-380
14. Wasson, J.R., 1984, Anal. Chem., 56, 212R-219R.
15. Reynolds, W.F. e col., 1986, Tetrahedron 42 (13), 3419-3428.
16. Patra, A. e col., 1981, Org. Magn. Reson. 17 (3), 166-168.

17. Rich, E., 1988, *Inteligencia Artificial*, McGraw - Hill, S. Paulo  
503 pp.
18. Matusch, R.; Haberlein, H., 1987, *Helv. Chim. Acta*, **70**, 342-6
19. Gastmans, J.P. e col., resultados nao publicados.
20. Gastmans, J.P. e col., resultados nao publicados.
21. Sakurai, N. e col., 1987, *Phytochemistry*, **26** (1), 217-219.
22. Ogihara, K. e col., 1987, *Phytochemistry*, **26** (3), 783-785.
23. Carpenter, R.C. e col., 1980, *Organ. Magn. Reson.*, **14** (6), 462-5.
24. Pradhan, B. P. e col., 1984, *Phytochemistry* **23** (11), 2593-5.
25. Das, M.C.; Mahato, S.B., 1982, *Phytochemistry* **21** (8), 2069-73.
26. Herz, W.; Watanabe, K., 1983, *Phytochemistry* **22** (6), 1457-9.
27. Herz, W.; Kulanthaivel, P., 1983, *Phytochemistry* **22** (2), 513-21.
28. Eijk, G.W. e col., 1986, *Tetrahedron Letters* **27** (22), 2533-4.
29. Wilkins, A.L. e col., 1987, *Phytochemistry* **25**, 503-7.
30. Wenkert, E. e col., 1978, *Phytochemistry* **11** (7), 337-343.
31. Gonzalez, A. G. e col., 1982, *Phytochemistry* **21** (2), 470-471.
32. Palmer, M.A.; Bowden, B.N., 1975, *Phytochemistry* **14** (8), 1813-15.
33. Palmer, M.A.; Bowden, B.N., 1975, *Phytochemistry* **14** (9), 2049-53.
34. Dantanarayana, A.P. e col., 1982, *Phytochemistry* **21** (8), 2065-8.
35. Bentacor, C. e col., 1980, *Phytochemistry* **19**, 1989-1993.
36. Kojima, H. e col., 1987, *Phytochemistry* **26** (4), 1107-1111.
37. Savona, G. e col., 1987, *Phytochemistry* **26** (12), 3305-8.
38. Garcia-Alvarez, M.C. e col., 1981, *Phytochemistry* **20** (3), 481-3.
39. Dubey, R.C.; Misra, K., 1976, *Indian Sugar* **26** (3), 133-8.
40. Deshmane, S.S.; Dev, S., 1971, *Tetrahedron* **27** (6), 1109-18.
41. Blunt, J.W. e col., 1980, *Org. Magn. Reson.*, **13** (1), 26-27.
42. Smith, R.M.; Smith, M.M., 1978, *Phytochemistry* **17** (8), 1307-12.

43. Ohmoto, T. e col., 1970, Phytochemistry 9 (10), 2137-48.
44. Preiss, A. e col., 1986, Magn. Reson. Chem. 24, 915-8.
45. Adam, G., e col., 1982, Phytochemistry 21 (6), 1385-7.
46. Corbett, R.E.; Cong, A.N.T., 1985, J. Chem. Soc. Perkin Trans. I, 2051-56.
47. Gunatilaka, A.A.L. e col., 1983, Phytochemistry 22 (4), 991-2.
48. Gunatilaka, A.A.L. e col., 1982, Phytochemistry 21 (8), 2061-3.
49. Kumar, V. e col., 1985, Phytochemistry 24 (9), 2067-9.
50. Prakash, O. e col., 1987, Magn. Reson. Chem. 25, 39-41.
51. Patra, A.; Chaudhuri, S.K., 1987, Magn. Reson. Chem. 25, 95-100.
52. Gunatilaka, A.A.L. e col., 1980, Org. Magn. Reson. 14 (5), 415-7.
53. Gottlieb, H.E. e col., 1985, Magn. Reson. Chem. 23 (8), 616-20.
54. Gunatilaka, A.A.L. e col., 1982, Org. Magn. Reson. 18 (1), 53-4.
55. Gunatilaka, A.A.L. e col., 1983, J. Chem. Perkin Trans. I, 2459-69.
56. Seo, S. e col., 1975, Tetrahedron Letters (1), 7-10
57. Haskins, F. A.; Gorz, H.J., 1983, Phytochemistry 22 (2), 611-2.
58. Misso, N.L.A.; Goad, L.J., 1984, Phytochemistry 23 (1), 73-82.
59. Houghton, P.J.; Lian, L.M., 1986, Phytochemistry 25 (8), 1939-44.
60. Takahashi, K.; Takani, M., 1978, Chem. Pharm. Bull. 26 (9), 2689-93.
61. Kojima, H.; Ogura, H., 1986, Phytochemistry 25 (3), 729-733, .
62. Furuya, T. e col., 1987, Phytochemistry 26 (3), 715-9.
63. Sousa, M.P. e col., 1984, Phytochemistry 23 (11), 2589-92.
64. Matos, M.E.O. e col., 1986, Phytochemistry 25 (6), 1419-22.
65. Sakakibara, J.; Kaiya, T., 1983, Phytochemistry 22 (11), 2547-52.
66. Dharmaratne, H.R.W. e col., 1984, Phytochemistry 23 (11), 2601-3.
67. Bruno, M. e col., 1987, Phytochemistry 26 (2), 497-501.
68. Barnes, R.A. e col., 1984, Chem. Pharm. Bull. 32 (9), 3674-7.

69. Ikuta, A.; Itokawa, H., 1986, Phytochemistry 25 (7), 1625-8.
70. Rao, G.S.R. e col., 1986, Indian J. Chem. 25B (feb), 113-122.
71. Hamburger, M.; Hostettmann, K., 1986, Helv. Chim. Acta 69, 221-7.
72. Delgado, M.C.C. e col., 1984, Phytochemistry 23 (10), 2289-92.
73. Tori, K. e col., 1974, Tetrahedron Letters 48, 4227-30.
74. Al-Hazimi, H.M.G. e col., 1987, Phytochemistry 26 (4), 1091-3.
75. Kong, F. e col., 1986, Tetrahedron Letters 27 (47), 5765-8.
76. Tori, K. e col., 1976, Tetrahedron Letters (46), 4163-66.
77. Anjaneyulu, A.S.R. e col., 1979, Phytochemistry 18, 463-6.
78. Amoros, M.; Girre, R.L., 1987, Phytochemistry 26 (3), 787-791.
79. Diaz, J.G. e col., 1984, Phytochemistry 23 (7), 1471-3.

**ANEXO I**

```

SUBROUTINE TERPCONF
  IMPLICIT INTEGER(I-N)
  CHARACTER*24 NOME(50)
  DIMENSION IESK(50)
  COMMON A(100),IMULT(100),B(100),IT(100),JSIN(200),JESQ(200),
1JREF(200),XSEM(200),ISIN,SIM3,PL3,NSI,J,JNUM(200),IC,ICH,
2ICH2,ICH3,IPO(30),IHIDRO,INULT(200)
  OPEN(1,FILE='CLAUDIA',STATUS='OLD')
  OPEN(2,FILE='NOMETRI',STATUS='OLD')
  DO 995 K=1,18
  READ(2,998) IESK(K),NOME(K)
998  FORMAT(I3,A24)
995  CONTINUE
  WRITE(*,880)
860  FORMAT(10X,'Quantas subst. tem no banco , em I3')
  READ(*,881) IBANCO
881  FORMAT(I3)
  WRITE(*,800)
800  FORMAT(10X,'Entre com desvio maximo p/ confront. em I2 ')
  READ(*,801) ILIM
801  FORMAT(I2)
  WRITE(*,2)
  2  FORMAT(10X,'Aguarde por favor',/)
  NSI=0
  NZ=0
808  IK=0
  DO 807 J=1,ISIN-1
  1  FORMAT(I3)
  IF(A(J).LE.A(J+1)) GO TO 807
  TEMP=A(J)
  A(J)=A(J+1)
  ICA=INULT(J)
  INULT(J)=INULT(J+1)
  A(J+1)=TEMP
  INULT(J+1)=ICA
  IK=IK+1
807  CONTINUE
  IF(IK.GT.0) GO TO 808
  DO 810 J=1,IBANCO
  PL=0.
  PM=0.
  READ(1,811) IESQ,IREF,(B(K), K=1,40)
  READ(1,812) INUM,IREF,(IT(K), K=1,40)
811  FORMAT(2I3,1X,40F5.1)
812  FORMAT(2I3,1X,40I1)
  IP=1
  IK=0
  NSI=0
  PL1=0.
  PL3=0.
  10  L=1+IK
  20  PL=A(L)-B(IP)
  PM=INULT(L)-IT(IP)
  50  IF(PL.GE.-ILIM) THEN
  IF(PL.LE.ILIM) THEN
  GO TO 65
  ELSE
  GO TO 70
  ENDIF

```

```

65  IF(PM.EQ.0.) THEN
    GO TO 130
    ELSE
    GO TO 70
    ENDIF
    ELSE
    GO TO 70
    ENDIF
70  IF(L.EQ.ISIN) GO TO 90
    L=L+1
    GO TO 20
90  IF(IP.LT.40) GO TO 110
    GO TO 250
110  IP=IP+1
    GO TO 10
130  NSI=NSI+1
    PL1=PL*PL
    PL3=PL3+PL1
    PL1=0.
    IK=IK+1
    IF(IP.EQ.40) GO TO 250
    IF(L.EQ.ISIN) GO TO 250
    IP=IP+1
    L=L+1
    GO TO 20
250  L=1
    IP=1
    IK=0
    JSIN(J)=NSI
    JNUM(J)=INUM
    JREF(J)=IREF
    JESQ(J)=IESQ
    CALL TERPSEME
    XSEM(J)=SIM3
810  CONTINUE
850  MCONT=0
    DO 820 J= 1, IBANCO-1
    IF(XSEM(J).GE.XSEM(J+1)) GO TO 820
    TUDO=XSEM(J)
    XSEM(J)=XSEM(J+1)
    XSEM(J+1)=TUDO
    M=JSIN(J)
    JSIN(J)=JSIN(J+1)
    JSIN(J+1)=M
    MA=JREF(J)
    JREF(J)=JREF(J+1)
    JREF(J+1)=MA
    MB=JESQ(J)
    JESQ(J)=JESQ(J+1)
    JESQ(J+1)=MB
    MC=JNUM(J)
    JNUM(J)=JNUM(J+1)
    JNUM(J+1)=MC
    MCONT=MCONT+1
820  CONTINUE
    IF(MCONT.GT.0) GO TO 850
    WRITE(*,860)
860  FORMAT(10X,'Voce quer saber as semelhancas da sua amostra ')
    WRITE(*,861)
861  FORMAT(10X,'com quantas subs. do banco ?, em I3 ')

```

```
      READ(*,862) LA
862  FORMAT(I3)
      WRITE(*,863)
863  FORMAT(5X,'SUBST. - ESQUELETO           - SEMEL.-SINAIS- REF.')
```

```
      DO 865 J= 1, LA
          DO 900 K=1,18
              IF(JESQ(J).EQ.IESK(K)) THEN
                  WRITE(*,866) JNUM(J),NOME(K),XSEM(J),JSIN(J),JREF(J)
866  FORMAT(3X,I4,4X,A24,2X,F5.3,2X,I4,1X,I4)
                  GO TO 900
              ELSE
                  ENDIF
900  CONTINUE
865  CONTINUE
      RETURN
      END
```

C>^C

C>



```

SUBROUTINE TERPTIPO
  IMPLICIT INTEGER(I-N)
  COMMON A(100),IMULT(100),B(100),IT(100),JSIN(200),JESQ(200),
1JREF(200),XSEM(200),ISIN,SIM3,PL3,NSI,J,JNUM(200),IC,ICH,
2ICH2,ICH3,IPO(30),IHIDRO,INULT(200)
  IF(IC.EQ.6) THEN
    IF(ICH.EQ.7) THEN
      IF(ICH2.EQ.9) THEN
        IF(ICH3.EQ.8) THEN
          WRITE(*,13)
13  FORMAT(10X,'Pode ser um Ursano ou Taraxasterano')
          GO TO 150
        ELSE
          GO TO 21
        ENDIF
      ELSE
        GO TO 21
      ENDIF
    ELSE
        GO TO 21
      ENDIF
    ELSE
        GO TO 21
      ENDIF
21  IF(IC.EQ.6) THEN
    IF(ICH.EQ.5) THEN
      IF(ICH2.EQ.12) THEN
        IF(ICH3.EQ.7) THEN
          WRITE(*,15)
15  FORMAT(10X,'Pode ser um Lupano')
          GO TO 150
        ELSE
          GO TO 31
        ENDIF
      ELSE
        GO TO 31
      ENDIF
    ELSE
        GO TO 31
      ENDIF
31  IF(IC.EQ.7) THEN
    IF(ICH.EQ.4) THEN
      IF(ICH2.EQ.11) THEN
        IF(ICH3.EQ.8) THEN
          WRITE(*,19)
19  FORMAT(10X,'Pode ser um Taraxerano')
          GO TO 150
        ELSE
          GO TO 49
        ENDIF
      ELSE
        GO TO 49
      ENDIF
    ELSE
        GO TO 49
      ENDIF

```

```

        ENDIF
        ELSE
        GO TO 49
        ENDIF
49  IF(IC.EQ.7) THEN
        IF(ICH.EQ.5) THEN
        GO TO 57
        ELSE
        GO TO 100
        ENDIF
57  IF(ICH2.EQ.10) THEN
        GO TO 58
        ELSE
        GO TO 70
        ENDIF
58  IF(ICH3.EQ.8) THEN
        WRITE(*,59)
59  FORMAT(10X,'Pode ser Oleanano ou Taraxerano')
        WRITE(*,60)
60  FORMAT(10X,'Preciso dos C sp2 em F5.1 ',/)
        READ(*,61) SI1,SI2
61  FORMAT(2F5.1)
        IF(SI1.GE.119.0) THEN
        IF(SI1.LE.129.0) THEN
        GO TO 65
        ELSE
        GO TO 120
        ENDIF
        ELSE
        GO TO 120
        ENDIF
65  IF(SI2.GE.133.0) THEN
        IF(SI2.LE.148.0) THEN
        WRITE(*,52)
52  FORMAT(10X,'Os sinais dos C sp2 indicam oleanano ')
        GO TO 150
        ELSE
        GO TO 120
        ENDIF
        ELSE
        GO TO 120
        ENDIF
120  IF(SI1.GE.114.0) THEN
        IF(SI1.LT.119.0) THEN
        GO TO 66
        ELSE
        WRITE(*,1)
        WRITE(*,2)
        1  FORMAT(10X,'Nao consigo diferenciar ')
        2  FORMAT(10X,'Dados inconsistentes ')
        GO TO 150
        ENDIF
66  IF(SI2.GE.151.0) THEN
        WRITE(*,67)
67  FORMAT(10X,'Os sinais dos C sp2 indicam taraxerano ')
        GO TO 150
        ELSE
        WRITE(*,1)
        WRITE(*,2)
        ENDIF

```

```
        ELSE
        ENDIF
        ELSE
        ENDIF
130  IF(ICH.EQ.4) THEN
        IF(ICH2.EQ.11) THEN
        GO TO 68
        ELSE
        ENDIF
68  IF(ICH3.EQ.8) THEN
        WRITE(*,69)
69  FORMAT(10X,'Dados inconsistentes')
        GO TO 150
        ELSE
        GO TO 70
        ENDIF
        ELSE
        ENDIF
70  IF(IC.EQ.6) THEN
        IF(ICH.EQ.6) THEN
        GO TO 71
        ELSE
        GO TO 74
        ENDIF
        ENDIF
71  IF(ICH2.EQ.10) THEN
        GO TO 72
        ELSE
        GO TO 74
        ENDIF
72  IF(ICH3.EQ.8) THEN
        CALL TERPHIDR
        IF(IHIDRO.LT.1) THEN
        WRITE(*,80)
80  FORMAT(10X,'Pode ser um Hursano sem Hidroxilacao')
        GO TO 150
        ELSE
        GO TO 81
        ENDIF
        ELSE
        GO TO 81
        ENDIF
81  IF(ICH3.EQ.7) THEN
        WRITE(*,82)
82  FORMAT(10X,'Pode ser um Nor-oleanano ')
        ELSE
        GO TO 150
        ENDIF
        ELSE
        ENDIF
74  IF(IC.EQ.5) THEN
        IF(ICH.EQ.6) THEN
        GO TO 85
        ELSE
        GO TO 90
        ENDIF
83  IF(ICH2.EQ.11) THEN
        GO TO 86
        ELSE
        GO TO 90
```

```
      ENDIF
86  IF(ICH3.EQ.8) THEN
      CALL TERPHIDR
      WRITE(*,999) IHIDRO
999  FORMAT(10X,'IHIDRO= ',I3,/)
      IF(IHIDRO.LT.1) THEN
      WRITE(*,87)
87  FORMAT(10X,'Pode ser um Hopano ou Lupanos( sem hidroxilacao)',/)
      GO TO 150
      ELSE
      GO TO 88
      ENDIF
      ELSE
      GO TO 88
      ENDIF
88  IF(ICH3.EQ.7) THEN
      WRITE(*,89)
89  FORMAT(10X,'Dados inconsistentes')
      GO TO 150
      ELSE
      GO TO 90
      ENDIF
      ELSE
      ENDIF
90  IF(IC.EQ.4) THEN
      IF(ICH.EQ.7) THEN
      GO TO 91
      ELSE
      GO TO 94
      ENDIF
91  IF(ICH2.EQ.11) THEN
      GO TO 92
      ELSE
      GO TO 94
      ENDIF
92  IF(ICH3.EQ.7) THEN
      WRITE(*,93)
93  FORMAT(10X,'Pode ser um nor-lupano ')
      GO TO 150
      ELSE
      GO TO 94
      ENDIF
      GO TO 94
      ELSE
      ENDIF
94  IF(IC.EQ.5) THEN
      IF(ICH.EQ.7) THEN
      GO TO 95
      ELSE
      GO TO 150
      ENDIF
95  IF(ICH2.EQ.12) THEN
      GO TO 96
      ELSE
      GO TO 98
      ENDIF
96  IF(ICH3.EQ.20) THEN
      WRITE(*,97)
97  FORMAT(10X,'Dados inconsistentes',/)
      GO TO 150
```

```
        ELSE
        GO TO 100
        ENDIF
98  IF(ICH2.EQ.11) THEN
        GO TO 99
        ELSE
        GO TO 100
        ENDIF
99  IF(ICH3.EQ.8) THEN
        WRITE(*,135)
135  FORMAT(10X,'Dados inconsistentes',/)
        GO TO 150
        ELSE
        GO TO 100
        ENDIF
        ELSE
        GO TO 100
        ENDIF
100  IF(IC.EQ.6) THEN
        IF(ICH.EQ.5) THEN
        GO TO 101
        ELSE
        GO TO 104
        ENDIF
101  IF(ICH2.EQ.11) THEN
        GO TO 102
        ELSE
        GO TO 104
        ENDIF
102  IF(ICH3.EQ.8) THEN
        WRITE(*,103)
103  FORMAT(10X,'Pode ser um Friedelano',/)
        GO TO 150
        ELSE
        GO TO 104
        ENDIF
        ELSE
        ENDIF
104  IF(IC.EQ.5) THEN
        IF(ICH.EQ.7) THEN
        GO TO 105
        ELSE
        GO TO 108
        ENDIF
105  IF(ICH2.EQ.10) THEN
        GO TO 106
        ELSE
        GO TO 108
        ENDIF
106  IF(ICH3.EQ.8) THEN
        WRITE(*,107)
107  FORMAT(10X,'Pode ser um Hopano ou Lupano')
        GO TO 150
        ELSE
        GO TO 108
        ENDIF
        ELSE
        ENDIF
108  IF(IC.EQ.6) THEN
        IF(ICH.EQ.6) THEN
```

```
      GO TO 109
      ELSE
GO TO 214
      ENDIF
109  IF(ICH2.EQ.11) THEN
      GO TO 110
      ELSE
      GO TO 214
      ENDIF
110  IF(ICH3.EQ.7) THEN
      WRITE(*,111)
111  FORMAT(10X,'Pode ser Lupano ou Taraxasterano')
      DO 112 J=1, ISIN
      IF(A(J).GT.152.0) THEN
      IF(A(J).LE.157.0) THEN
      WRITE(*,113) A(J)
113  FORMAT(10X,'O sinal a ',F5.1, 'sugere mais um Taraxasterano')
      ELSE
      GO TO 112
      ENDIF
      GO TO 214
      ELSE
      GO TO 112
      ENDIF
112  CONTINUE
      ELSE
      GO TO 214
      ENDIF
      ELSE
      GO TO 214
      ENDIF
214  IF(IC.EQ.6) THEN
      IF(ICH.EQ.4) THEN
      GO TO 115
      ELSE
      GO TO 118
      ENDIF
115  IF(ICH2.EQ.12) THEN
      GO TO 116
      ELSE
      GO TO 118
      ENDIF
116  IF(ICH3.EQ.8) THEN
      CALL TERPHIDR
      IF(IHIDRO.LT.1) THEN
      WRITE(*,117)
117  FORMAT(10X,'Pode ser um Friedelano')
      GO TO 150
      ELSE
      GO TO 118
      ENDIF
      ELSE
      GO TO 118
      ENDIF
      ELSE
      GO TO 118
      ENDIF
118  WRITE(*,119)
      WRITE(*,151)
      WRITE(*,121)
```

```
        WRITE(*,152)
        WRITE(*,153)
119  FORMAT(10X,'Com a analise dos C sp2, CDH, CHO e CO2H e a ')
151  FORMAT(10X,'desfuncionalizacao nao foi possivel indicar ')
121  FORMAT(10X,'um esqueleto ')
152  FORMAT(10X,'Veja as melhores semelhancas no procedimento de')
153  FORMAT(10X,'confrontacao, que podem tambem indicar o esqueleto',/)
      RETURN
150  END
```

C>

```
SUBROUTINE TERPSEME
  COMMON A(100),IMULT(100),B(100),IT(100),JSIN(200),JESQ(200),
1JREF(200),XSEM(200),ISIN,SIM3,PL3,NSI,J,JNUM(200),IC,ICH,
2ICH2,ICH3,IPO(30),IHIDRO,INULT(200)
  DATA FAT,I/1.0,2/
    ST=0.
    PL4=0.
    PL5=0.
    PL6=0.
    PL7=0.
  SIM1=0.
    SIM2=0.
    SIM3=0.
    IF(NSI.EQ.0) GO TO 50
  I1=I*I
  ST=NSI*I1
  PL4=PL3/ST
  PL5=(1-NSI/ISIN)
  PL6=(1-NSI/30.0)
  PL7=PL5*PL6
  SIM1=(1/(I+FAT))*(1/(3-FAT))
  SIM2=(1/(1+(FAT*PL4)))*(1/(1+(2-FAT)* PL7))
  SIM3=(SIM2-SIM1)/(1-SIM1)
50 RETURN
END
```

C>



```

SUBROUTINE TERPHIDR
IMPLICIT INTEGER(I-N)
DIMENSION IM(100)
CHARACTER*20 RESP
CHARACTER*20 PORQ
COMMON A(100),IMULT(100),B(100),IT(100),JSIN(200),JESQ(200),
1JREF(200),XSEM(200),ISIN,SIM3,PL3,NSI,IO2,JNUM(200),IC,ICH,
2ICH2,ICH3,IPO(30),IHIDRO,INULT(200)
IO=1
IHIDRO=0
IPX=0
ICONT=0
DO 250 L=1,ISIN
IF(A(L).GT.60.0) THEN
IF(A(L).LT.67.0) THEN
WRITE(*,101)A(L),IMULT(L)
WRITE(*,102)
WRITE(*,103)
101 FORMAT(10X,'Duvida com o C a ',F5.1,' mult= ',I2)
102 FORMAT(10X,'Este delta pode ser um OH ou um CH')
103 FORMAT(10X,'se for um OH entre com S senao entre com N',/)
READ(*,106) RESP
106 FORMAT(A6)
IF(RESQ.EQ.'S') THEN
IF(IMULT(L).EQ.2) THEN
IHIDRO=IHIDRO+1
ICONT=ICONT+1
IF(ICONT.LE.1) GO TO 250
GO TO 235
ELSE
ENDIF
IF(IMULT(L).NE.2) THEN
IO=IO+1
GO TO 240
ELSE
ENDIF
ELSE
GO TO 250
ENDIF
ELSE
GO TO 202
ENDIF
202 IF(A(L).LE.87) THEN
IF(IMULT(L).EQ.2) THEN
ICONT=ICONT+1
IHIDRO=IHIDRO+1
IF(ICONT.LE.1) GO TO 250
GO TO 235
ELSE
ENDIF
IF(IMULT(L).NE.2) THEN
IO=IO+1
GO TO 240
ELSE
GO TO 250
ENDIF
ELSE
GO TO 250
ENDIF
ENDIF

```

```

        ELSE
        GO TO 250
        ENDIF
235     IO=IO+1
240     IM(IO-1)=IMULT(L)
250     CONTINUE
        IF(IO.GT.1) THEN
            IAM=1
            IPX=IPX+1
            IPO(IPX)=IAM
        IO2=IO-1
C-VER  QUAL A MULTIPLICIDADE DA SEG. OH
DO 280 J=1,IO
C
        IF(IM(J).EQ.1) THEN
            ICH=ICH+1
            IC=IC-1
        ELSE
        ENDIF
        IF(IM(J).EQ.2) THEN
            ICH2=ICH2+1
            ICH=ICH-1
        ELSE
        ENDIF
        IF(IM(J).EQ.3) THEN
            ICH3=ICH3+1
            ICH2=ICH2-1
        ELSE
        ENDIF
280     CONTINUE
        ELSE
            IAM=2
            IPX=IPX+1
            IPO(IPX)=IAM
        ENDIF
        RETURN
        END

```

C>

C&gt;

```

PROGRAM TERPMULT
IMPLICIT INTEGER(I-N)
DIMENSION IM(100)
  CHARACTER*20 PORO
  CHARACTER*20 MUDA
COMMON A(100),IMULT(100),B(100),IT(100),JSIN(200),JESQ(200),
1JREF(200),XSEM(200),ISIN,SIM3,PL3,NSI,I02,JNUM(200),IC,ICH,
2ICH2,ICH3,IPO(30),IHIDRO,INULT(200)
  IPX=0
  WRITE(*,200)
200  FORMAT(10X,'Entre com o numero de sinais da amostra em I3')
  READ(*,201) ISIN
201  FDMAT(I3)
  DO 204 J=1,ISIN
  WRITE(*,202) J
202  FORMAT(10X,'Entre com o sinal e multip. no.',I2,' em F5.1 I1')
  READ(*,203) A(J),IMULT(J)
203  FORMAT(F5.1,1X,I3)
  INULT(J)=IMULT(J)
204  CONTINUE
  19  WRITE(*,20)
  20  FORMAT(10X,'Voce quer mudar algum dado S/N ?')
  25  READ(*,21) MUDA
  21  FORMAT(A6)
  44  IF(MUDA.EQ.'S') THEN
  WRITE(*,22)
  22  FORMAT(10X,'Entre com o no. do sinal a ser mudado em I2')
  READ(*,23) K
  23  FORMAT(I2)
  WRITE(*,34)
  34  FORMAT(10X,'Entre com o sinal e a multip. F5.1 I1')
  READ(*,35) A(K),IMULT(K)
  35  FORMAT(F5.1,1X,I1)
  ELSE
  GO TO 24
  ENDIF
  WRITE(*,26)
  26  FORMAT(10X,'Tem mais dado a ser trocado S/N?')
  READ(*,21) MUDA
  IF(MUDA.EQ.'S') GO TO 44
  24  IC=0
  ICH=0
  ICH2=0
  ICH3=0
  DO 210 L=1,ISIN
  IF(IMULT(L).EQ.1) THEN
  IC=IC+1
  GO TO 210
  ELSE
  ENDIF
  IF(IMULT(L).EQ.2) THEN
  ICH=ICH+1
  GO TO 210
  ELSE
  ENDIF
  IF(IMULT(L).EQ.3) THEN
  ICH2=ICH2+1

```

```

GO TO 210
ELSE
ENDIF
IF(IMULT(L).EQ.4) THEN
ICH3=ICH3+1
GO TO 210
ELSE
ENDIF
210 CONTINUE
WRITE(*,999)
999 FORMAT(10X,'As multiplicidades fornecidas foram ')
IPX=0
WRITE(*,1000) IC,ICH,ICH2,ICH3
1000 FORMAT(10X,' IC= ',I3,' ICH= ',I3,' ICH2= ',I3,' ICH3= ',I3,/)
CALL TERPHIDR
IPX=2
C MUDANCA DE CO E CHO(ALDEIDO)
ICONT=0
IOK=1
DO 400 J=1,ISIN
IF(A(J).GE.190.0) THEN
IF(A(J).LE.250.0) THEN
IF(IMULT(J).LE.2) THEN
ICONT=ICONT+1
GO TO 435
ELSE
ENDIF
GO TO 400
ELSE
ENDIF
GO TO 400
435 IOK=IOK+1
IM(IOK-1)=IMULT(J)
ELSE
ENDIF
400 CONTINUE
IF(IOK.GT.1) THEN
IAM=3
IPX=IPX+1
IPO(IPX)=IAM
IO3=IOK-1
DO 410 J=1, IOK-1
IF(IM(J).EQ.1) THEN
IC=IC-1
ICH2=ICH2+1
GO TO 410
ELSE
ENDIF
IF(IM(J).EQ.2) THEN
ICH=ICH-1
ICH3=ICH3+1
ELSE
ENDIF
410 CONTINUE
ELSE
IAM=4
IPX=IPX+1
IPO(IPX)=IAM
ENDIF
C MUDANCA DE CO2H

```

```

ICONT=0
IO=1
DO 415 J=1,ISIN
IF(A(J).GE.170.0) THEN
  IF(A(J).LT.189.0) THEN
    IF(IMULT(J).EQ.1) THEN
      ICONT=ICONT+1
      GO TO 414
    ELSE
      ENDIF
    GO TO 415
  ELSE
    ENDIF
  GO TO 415
414  IO=IO+1
     IM(IO-1)=IMULT(J)
     ELSE
415  CONTINUE
     IF(IO.GT.1) THEN
       IAM=5
       IPX=IPX+1
       IPO(IPX)=IAM
       IO4=IO-1
       DO 420 J=1,IO-1
         IF(IM(J).EQ.1) THEN
           IC=IC-1
           ICH3=ICH3+1
         ELSE
420  CONTINUE
           ELSE
             IAM=6
             IPX=IPX+1
             IPO(IPX)=IAM
             ENDIF
C VERIFICA DUPLAS ADICIXNAIS
       IADUP=0
       IX=0
       DO 450 J=1,ISIN
         IF(IMULT(J).LT.4.) THEN
           IF(A(J).GE.100.0) THEN
             IF(A(J).LE.165.0) THEN
               IADUP=IADUP+1
               GO TO 445
             ELSE
               GO TO 450
             ENDIF
445  IX=IX+1
           IM(IADUP)=IMULT(J)
           GO TO 450
           ELSE
             ENDIF
           GO TO 450
         ELSE
           ENDIF
450  CONTINUE
C SE TEM DUPLAS ADICIXNAIS FAZ AS TROCAS
       IP=0
       IF(IX.GT.2) THEN

```

```

    IAM=7
    IPX=IPX+1
    IPO(IPX)=IAM
IX5=IX-2
    IK=0
    IU=0
    IP=1
    DO 460 J=1,IX
    IF(IM(J).EQ.2) THEN
        IF(IU.EQ.0) THEN
            IM(J)=8
            IU=IU+1
            GO TO 460
        ELSE
            ENDIF
    ELSE
    ENDIF
    IF(IM(J).EQ.1) THEN
        IF(IK.EQ.0) THEN
            IK=IK+1
            IM(J)=7
            GO TO 460
        ELSE
            ENDIF
    ELSE
    ENDIF
460 CONTINUE
    ELSE
    IAM=8
    IPX=IPX+1
    IPO(IPX)=IAM
    ENDIF
    IF(IP.LT.1) GO T296
    DO 470 J=1,IX
    IF(IM(J).EQ.1) THEN
        IC=IC-1
        ICH=ICH+1
GO TO 470
    ELSE
    ENDIF
    IF(IM(J).EQ.2) THEN
        ICH=ICH-1
        ICH2=ICH2+1
        GO TO 470
    ELSE
    ENDIF
    IF(IM(J).EQ.3) THEN
        ICH2=ICH2-1
        ICH3=ICH3+1
        GO TO 470
    ELSE
    ENDIF
470 CONTINUE
    DO 480 J=1,IO
        IF(IM(J).GT.5) THEN
            IM(J)=IM(J)-1
        ELSE
        ENDIF
480 CONTINUE
296 WRITE(*,998)

```

93

```

998 FORMAT(10X,'As novas multiplicidades sao:')
299 WRITE(*,1000) IC,ICH,ICH2,ICH3
215 FORMAT(4I4)
    WRITE(*,11)
11  FORMAT(10X,'Voce quer saber como foi a desfuncionalizacao S/N ?')
    READ(*,12) PORQ
12  FORMAT(A6)
    IF(PORQ.EQ.'S') THEN
DO 13 K=1, IPX
IF(IPO(K).EQ.1) THEN*
    WRITE(*,1) I02
    WRITE(*,2)
    ELSE
    ENDIF
    IF(IPO(K).EQ.2) THEN
    WRITE(*,3)
    ELSE
    ENDIF
    IF(IPO(K).EQ.3) THEN
    WRITE(*,4) I03
    WRITE(*,5)
    ELSE
    ENDIF
    IF(IPO(K).EQ.4) THEN
    WRITE(*,6)
    ELSE
    ENDIF
    IF(IPO(K).EQ.5) THEN
    WRITE(*,7) I04
    ELSE
    ENDIF
    IF(IPO(K).EQ.6) THEN
    WRITE(*,8)
    ELSE
    ENDIF
    IF(IPO(K).EQ.7) THEN
    WRITE(*,9) IX5
    WRITE(*,15)
    ELSE
    ENDIF
    IF(IPO(K).EQ.8) THEN
    WRITE(*,10)
    WRITE(*,16)
    ELSE
    ENDIF
13  CONTINUE
    ELSE
    ENDIF
1  FORMAT(10X,'Existem',I3,' carbonos com OH adicionais')
2  FORMAT(10X,'que tiveram suas multiplicidades mudadas',/)
3  FORMAT(10X,' Nao houve C-OH adicional: 60 a 87.0 ppm ',/)
4  FORMAT(10X,'Existem ',I3,' C=O mudados ')
5  FORMAT(10X,' C=O para CH2 e CHO para CH3',/)
6  FORMAT(10X,' Nao existem C=O e CHO entre 190.0 a 250.0 ',/)
7  FORMAT(10X,'Existem ',I3,' CO2H mudados ',/)
8  FORMAT(10X,' Nao existem CO2H(170.0-180.0 mult.= 1) ',/)
9  FORMAT(10X,'Existem ',I3,' carbonos sp2 que tiveram as suas')
15  FORMAT(10X,' multiplicidades mudadas',/)
10  FORMAT(10X,' Nao existem mais de dois C sp2 (100-165) ')
16  FORMAT(10X,' para serem mudados',/)

```

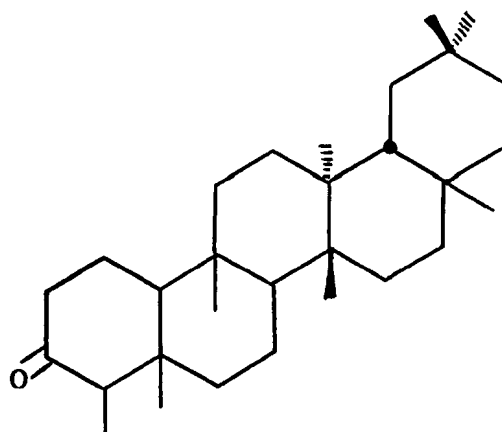
CALL TERPTIPO  
CALL TERPCONF

150 END

C>



Teste do Programa Terpetri  
com 3-oxo-friedelano



030           Entre com o numero de sinais da amostra em I3

022.3 3       Entre com o sinal e multip. no. 1 em F5.1 I1

041.4 3       Entre com o sinal e multip. no. 2 em F5.1 I1

212.8 1       Entre com o sinal e multip. no. 3 em F5.1 I1

058.1 2       Entre com o sinal e multip. no. 4 em F5.1 I1

042.0 1       Entre com o sinal e multip. no. 5 em F5.1 I1

041.2 3       Entre com o sinal e multip. no. 6 em F5.1 I1

018.1 3       Entre com o sinal e multip. no. 7 em F5.1 I1

053.0 2       Entre com o sinal e multip. no. 8 em F5.1 I1

037.4 1       Entre com o sinal e multip. no. 9 em F5.1 I1

059.4 2       Entre com o sinal e multip. no.10 em F5.1 I1

035.5 3       Entre com o sinal e multip. no.11 em F5.1 I1

030.4 3       Entre com o sinal e multip. no.12 em F5.1 I1

039.6 1       Entre com o sinal e multip. no.13 em F5.1 I1

038.2 1       Entre com o sinal e multip. no.14 em F5.1 I1

032.3 3       Entre com o sinal e multip. no.15 em F5.1 I1

035.9 3       Entre com o sinal e multip. no.16 em F5.1 I1

029.9 1       Entre com o sinal e multip. no.17 em F5.1 I1

042.8 2       Entre com o sinal e multip. no.18 em F5.1 I1

035.2 3       Entre com o sinal e multip. no.19 em F5.1 I1

028.0 1       Entre com o sinal e multip. no.20 em F5.1 I1

032.7 3       Entre com o sinal e multip. no.21 em F5.1 I1

039.2 3       Entre com o sinal e multip. no.22 em F5.1 I1

006.7 4       Entre com o sinal e multip. no.23 em F5.1 I1

014.5 4       Entre com o sinal e multip. no.24 em F5.1 I1

017.8 4       Entre com o sinal e multip. no.25 em F5.1 I1

018.5 4       Entre com o sinal e multip. no.26 em F5.1 I1

020.1 4       Entre com o sinal e multip. no.27 em F5.1 I1

032.0 4       Entre com o sinal e multip. no.28 em F5.1 I1

031.7 4       Entre com o sinal e multip. no.29 em F5.1 I1

034.9 4       Entre com o sinal e multip. no.30 em F5.1 I1

Hs multiplicidades fornecidas foram  
 IC= 7 ICH= 4 ICH2= 11 ICH3= 8

As novas multiplicidades sao:  
 IC= 6 ICH= 4 ICH2= 12 ICH3= 8

Voce quer saber como foi a desfuncionalizacao S/N ?

5

Nao houve C-OH adicional: 60 a 87.0 ppm

Existem 1 C=O mudados  
 C=O para CH2 e CHO para CH3

Nao existem CO2H(170.0-180.0 mult.= 1)

Nao existem mais de dois C sp2 (100-165)  
 para serem mudados

Pode ser um Friedelano  
 Quantas subst. tem no banco , em I3

01

Entre com desvio maximo p/ confront. em I2

Aguarde por favor

20

Voce quer saber as semelhancas da sua amostra  
 com quantas subs. do banco ?, em I3

SUBST.	- ESQUELETO	- SEMEL.-SINAIS-	REF.
61	Friedelano-II	.997	30 4
62	Friedelano-I	.632	19 98
21	Hopano-I	.520	14 101
115	Ursano-I	.512	13 18
37	Lupano	.511	12 12
124	Ursano-I	.501	13 18
3	Taraxerano-II	.500	13 13
6	Taraxerano-II	.497	12 13
10	Taraxerano-I	.496	13 89
140	Ursano-I	.495	11 16
32	Lupano	.495	13 12
110	Ursano-I	.494	12 44
123	Ursano-I	.493	12 40
7	Taraxerano-II	.493	12 13
9	Taraxerano-I	.490	11 13
36	Lupano-II	.489	12 11
40	Lupano-III	.488	12 11
117	Ursano-I	.484	11 18
111	Ursano-I	.484	13 44
26	Hopano-I	.484	11 101

A)

ADENDO

\_ Abreviaturas usadas na tese:

RMN de  $^{13}\text{C}$ : Ressonância Magnética Nuclear de Carbono 13

E.M.: Espectrometria de Massa

Estruturas:

