



LABORATÓRIO DE QUÍMICA ORGÂNICA SINTÉTICA – LQOS
COORDENADOR: PROF. LUIZ CARLOS DIAS
UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE QUÍMICA - UNICAMP
Cx. Postal 6154 - Campinas - 13083-970, SP - BRASIL
<http://www.iqm.unicamp.br>



PESQUISA EM FOSFOETANOLAMINA

RELATÓRIO EXECUTIVO

IDENTIFICAÇÃO, CARACTERIZAÇÃO E SÍNTESE DOS COMPONENTES DAS CÁPSULAS DE FOSFOETANOLAMINA (FOS) PARA O MCTI

Prof. Dr. Eliezer J. Barreiro – LASSBio/ICB-UFRJ

**Coordenador do Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Fármacos e Medicamentos –
INCT-INO FAR**

Prof. Dr. Luiz Carlos Dias – IQ-UNICAMP

Coordenador do Laboratório de Química Orgânica Sintética – LQOS

Este relatório executivo descreve sumariamente os resultados dos estudos patrocinados pelo Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Fármacos e Medicamentos (INCT-INO FAR, <http://www.inct-ino far.ccs.ufrj.br/>), realizados no Laboratório de Química Orgânica Sintética (LQOS) do Instituto de Química da Universidade Estadual de Campinas-UNICAMP, coordenado pelo Prof. Dr. Luiz Carlos Dias, em colaboração com o Laboratório de Avaliação e Síntese de Substâncias Bioativas (LASSBio), do Instituto de Ciências Biomédicas da Universidade Federal do Rio de Janeiro-UFRJ, coordenado pelo Prof. Dr. Eliezer J. Barreiro sobre os componentes químicos das cápsulas de fosfoetanolamina (FOS) oriundas do Instituto de Química da Universidade de São Paulo, São Carlos, SP.



LABORATÓRIO DE AVALIAÇÃO E SÍNTESE DE SUBSTÂNCIAS
BIOATIVAS – LASSBio
COORDENADOR: PROF. ELIEZER J. BARREIRO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO - UFRJ
Cx. Postal 68006 – Rio de Janeiro – 21941-910, RJ - BRASIL
<http://www.lassbio.icb.ufrj.br>





LABORATÓRIO DE QUÍMICA ORGÂNICA SINTÉTICA – LQOS
COORDENADOR: PROF. LUIZ CARLOS DIAS
UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE QUÍMICA - UNICAMP
Cx. Postal 6154 - Campinas - 13083-970, SP - BRASIL
<http://www.iqm.unicamp.br>



Cápsulas de FOSFOETANOLAMINA (FOS) provenientes do Instituto de Química de São Carlos da Universidade de São Paulo (IQSC-USP), encaminhadas pelo Ministério da Ciência, Tecnologia e Inovação (MCTI), foram destinadas ao Laboratório de Química Orgânica Sintética (LQOS), do Instituto de Química da UNICAMP (IQ-UNICAMP).

Dentre o total de 60 cápsulas recebidas, 16 cápsulas foram abertas e pesadas. Os pesos encontrados foram: 233 mg, 273 mg, 278 mg, 304 mg, 316 mg, 317 mg, 325 mg, 328 mg, 331 mg, 342 mg, 345 mg, 348 mg, 352 mg, 358 mg, 359 mg e 368 mg. A informação contida no rótulo era: FOSFOETANOLAMINA SINTÉTICA, 500 mg.

O conteúdo das mesmas, após pesagem, foi submetido à análise por ressonância magnética nuclear (RMN) de hidrogênio-1, de carbono-13 e fósforo-31 (RMN-¹H, RMN-¹³C e RMN-³¹P) que permitiu a identificação de componentes orgânicos e inorgânicos presentes, representados por:

Componente Orgânico 1: FOSFOETANOLAMINA (FOS) na forma de seu sal e associada ao sal da monoetanolamina (MEA.H⁺);

Componente Orgânico 2: FOSFOBISETANOLAMINA (FBEA), na forma de seu sal;

Componente Orgânico 3: MONOETANOLAMINA PROTONADA;

Componentes Inorgânicos: FOSFATOS E PIROFOSFATOS (Pi e PPI);

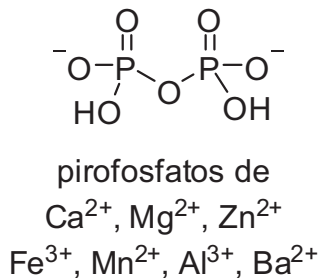
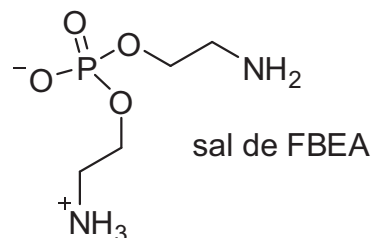
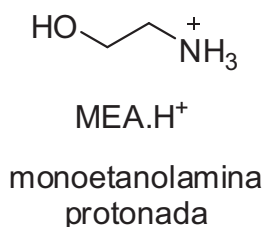
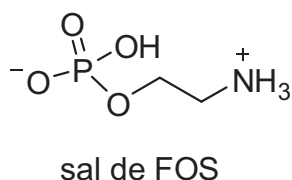
Os componentes orgânicos identificados, foram inequivocamente caracterizados por análises combinadas com padrões originais de origem comercial (Sigma Aldrich) e sintética. Estes componentes orgânicos sintéticos: FOSFOETANOLAMINA, FOSFOBISETANOLAMINA, CLORIDRATO DE MONOETANOLAMINA, foram preparados por síntese química no Laboratório de Química Orgânica Sintética (LQOS) do Instituto de Química da Universidade Estadual de Campinas-UNICAMP. Tiveram o grau de pureza (> 99%) determinado analiticamente e suas estruturas químicas confirmadas por análises de RMN de ¹H, ¹³C, ³¹P, espectrometria de massas, espectro de infravermelho e cristalografia de raios-X, no caso da fosfoetanolamina. Os resultados corroboraram a identificação e caracterização dos componentes identificados nas cápsulas.

A análise gravimétrica das cápsulas revelou que seu conteúdo apresenta 35,5% de material insolúvel em água destilada, em sua maior parte constituída de fosfato inorgânico

(Pi) na forma de cálcio e magnésio, mas também associado a outros íons metálicos como manganês, ferro, alumínio, zinco e bário.

Os resultados indicaram que as cápsulas de FOSFOETANOLAMINA (FOS) provenientes do Instituto de Química de São Carlos da Universidade de São Paulo (IQSC-USP), encaminhadas pelo Ministério da Ciência, Tecnologia e Inovação (MCTI), contém:

- 32,2% de FOSFOETANOLAMINA (FOS) - (sendo ca. 6,2% associada a íons metálicos);
- 18,2% de MONOETANOLAMINA PROTONADA (MEA.H⁺);
- 3,9% de FOSFOBISETANOLAMINA (FBEA);
- 34,9% de fosfatos de cálcio, magnésio, ferro, manganês, alumínio, zinco e bário (Pi);
- 3,6% de pirofosfatos de cálcio, magnésio, ferro, manganês, alumínio, zinco e bário (PPi);
- 7,2% de água (H₂O).



Estes resultados representam o sumário dos estudos químicos feitos para a identificação e caracterização dos componentes das cápsulas de provenientes do Instituto de Química de São Carlos da Universidade de São Paulo (IQSC-USP), encaminhadas pelo Ministério da Ciência, Tecnologia e Inovação (MCTI).