

## ESTUDO QUÍMICO DAS FRAÇÕES POLARES DA ESPÉCIE *Psychotria schlechtendaliana*

José Guilherme de Souza Corrêa (PIBIC/FA), Vagner Marques de Moura (PQ), Matheus Ardenghi Peixoto (PQ), Silvana Maria de Oliveira Santin (Orientadora), e-mail: smoliveira@uem.br

Universidade Estadual de Maringá / Centro de Ciências Exatas /  
Maringá, PR.

### Ciências Exatas e da Terra/Química

**Palavras-chave:** *Psychotria*, metabólitos secundários, alcaloides

### Resumo:

A família Rubiaceae apresenta grande diversidade em sua constituição e composição química. O gênero *Psychotria* é considerado o maior da família, e este tem sido caracterizado por metabolizar alcaloides bioativos de grande interesse científico por apresentar atividades anti-inflamatória, antitumoral e antimicrobiana, dentre outras. Além disso, estes metabólitos têm sido utilizados como uma importante ferramenta na classificação quimiotaxonômica das espécies do gênero *Psychotria*. Motivados pela ausência de estudos químicos da espécie *Psychotria schlechtendaliana* e a importância descrita para o gênero o presente trabalho objetivou na continuidade do estudo das partes aéreas desta espécie, e resultou no isolamento do alcaloide ácido strictosidínico e um derivado do ácido strictosidínico, ambos da fração butanólica.

### Introdução

A família Rubiaceae é encontrada em diversos ecossistemas, ocupando o quarto lugar em diversidade entre as angiospermas, sendo suplantada pelas Asteraceae, Orchidaceae e Fabaceae. Essa família reúne, aproximadamente, 620 gêneros e 13.100 espécies, sendo que no Brasil são encontradas cerca de 1.394 espécies, distribuídas em 122 gêneros (ZINI *et al.*, 2016). Rubiaceae compreende uma diversidade significativa em sua composição química, sendo que as classes dos flavonoides, iridoides e alcaloides ganham destaque, na qual diversas aplicações na área medicinal, com tais classes de compostos, são descritas na literatura. No que tange o gênero *Psychotria*, este é considerado o maior da família, representando cerca de 1.650 espécies, sendo estas reconhecidas pela produção de alcaloides bioativos (MENDONÇA *et al.*, 2015). No Brasil a pesquisa deste gênero inicialmente foi motivada por duas espécies *P. viridis* e *P. carthagenensis*, que são usadas juntamente com a espécie *Banisteriopsis caapi* na preparação do daime (*ayahuasca*), uma bebida alucinógena utilizada em fins religiosos por caboclos da Amazônia, (BOTH, 2005). Em

decorrência da importância de espécies do gênero *Psychotria* e da ausência de estudos químico e farmacológico para *P. schlechtendaliana* (nome popular não é relatado na literatura específica), esta espécie vem sendo objeto de estudos pelo nosso grupo de pesquisa com resultados promissores. O estudo químico das frações apolares da espécie resultou no isolamento e caracterização do alcaloide harmano, e dos triterpenos  $\alpha$ -amirina,  $\beta$ -amirina e ácido betulínico. O presente trabalho objetivou dar continuidade ao estudo, investigando as frações polares das partes aéreas desta espécie.

## Materiais e métodos

Os espectros de RMN  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$ , e bidimensionais (COSY, HSQC e HMBC) foram obtidos em espectrômetro Varian, operando à 300,06 MHz para  $^1\text{H}$  e 75,45 MHz para  $^{13}\text{C}$  e/ou Bruker Avance III HD 500,03MHz e 125,7MHz, para  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$ , respectivamente.

O material vegetal de *P. schlechtendaliana* foi submetido à secagem em estufa com ventilação forçada e triturado em moinho de facas, resultando em 273 g. Posteriormente, foi realizado o processo de maceração com *n*-hexano, para o desengorduramento e em seguida, metanol à frio, exaustivamente, obtendo-se o extrato bruto hexânico (EBHex - 5,65 g) e extrato bruto metanólico (EBMeOH - 44,52 g).

Parte do EBMeOH (19,60 g) foi solubilizado em MeOH:H<sub>2</sub>O (1:1) (150 mL) e submetido ao processo de extração ácido-base empregando uma solução de HCl 10% (100 mL) para acidificação. Realizou-se a extração, em funil de separação, com clorofórmio (CHCl<sub>3</sub>), obtendo-se a fração clorofórmica ácida (CHCl<sub>3</sub>H- 6,021 g). Posteriormente, o resíduo aquoso foi basificado com hidróxido de amônio (NH<sub>4</sub>OH) a pH 9-10, e realizou-se a extração com os solventes CHCl<sub>3</sub>, CHCl<sub>3</sub>:MeOH (1:1) e acetato de etila (AcOEt), obtendo as frações clorofórmica alcalina (CHCl<sub>3</sub>OH- 0,088 g), clorofórmica alcalina precipitado (CHCl<sub>3</sub>OH-ppt- 2,57 g), clorofórmio-metanólica (CHCl<sub>3</sub>:MeOH (1:1)- 0,35 g), acetato de etila alcalina (AcOEtOH- 0,02 g) e remanescente aquosa (H<sub>2</sub>O-10,00 g). A fração aquosa (9,00 g) foi solubilizada em H<sub>2</sub>O (60 mL) e submetida à purificação por partição líquido-líquido com AcOEt (3 x 50 mL), em funil de separação, obtendo-se desse processo a fração acetato de etila (AcOEt- 104,6 mg). O resíduo aquoso remanescente foi submetido à extração com butanol (BuOH; 3 x 35 mL), obtendo-se a fração butanólica (BuOH- 275,7 mg) e a fração remanescente aquosa (H<sub>2</sub>O- 8,00 g).

A fração BuOH (275,7 mg), foi submetida a uma cromatografia em coluna (CC) em gel de sílica 60 (14,56 g,  $\Theta = 1,5$  cm, h= 21 cm), empacotada com CHCl<sub>3</sub>:MeOH 10% com gotas de NH<sub>4</sub>OH (hidróxido de amônio). Os eluentes empregados foram CHCl<sub>3</sub>:MeOH, MeOH e MeOH:H<sub>2</sub>O, em gradiente de polaridade. Deste fracionamento, coletou-se 92 subfrações, que após a análise comparativa em CCD, foram reunidas em 17 novas subfrações. Desse processo, as subfrações 33-35 (6,0 mg) e 50-51 (7,0 mg), de coloração marrom e cristalinidade amorfa, foram codificadas por **PS-1** e **PS-2** respectivamente.

## Resultados e Discussão

O espectro de RMN de  $^1\text{H}$  (**Figura 1**) permitiu verificar a presença de sinais típicos de um sistema tetraidro- $\beta$ -carbolínico, sendo dois dupletos em  $\delta_{\text{H}}$  7,35 (*d*;  $J = 7,99$  Hz) e 7,21 (*d*;  $J = 8,35$ ) atribuídos aos hidrogênios aromáticos H-9 e H-12, respectivamente. E também, dois tripletos de dupletos em  $\delta_{\text{H}}$  6,93 (*td*;  $J = 7,63$  e  $0,64$ ; H-10) e 7,03 (*td*;  $J = 7,72$  e  $1,02$ ; H-11), bem como os hidrogênios metilênicos H-5 (*m*) e H-6 (*m*) observados em  $\delta_{\text{H}}$  6,62 e 2,97.

O duplete em  $\delta_{\text{H}}$  4,72 (*d*;  $J = 7,92$ ) foi atribuído ao hidrogênio anomérico H-1' pertencente a D- $\beta$ -glicose, indicando que este hidrogênio se encontra na posição axial, e o simpleto em 7,52, integrado para um hidrogênio, corresponde ao sinal típico de grupamento carbometóxi  $\alpha,\beta$ -insaturado, na qual foi atribuído ao H-17. Verificou-se também, os sinais em  $\delta_{\text{H}}$  5,21 (*d*;  $J = 16,85$ ; H-18b), 5,11 (*d*;  $J = 10,4$ ; H-18a) e 5,75 (*ddd*;  $J = 10,4$ ,  $J = 7,60$  e  $J = 13,3$ ; H-19) que correspondem aos hidrogênios olefínicos da unidade secologanínica.

A análise do espectro de RMN de  $^{13}\text{C}$  (**Figura 2**) possibilitou observar e atribuir os deslocamentos químicos  $\delta_{\text{C}}$  129,1 (C; C-2); 105,9 (C; C-7); 126,1 (C; C-8); 136,8 (C; C-13); 117,7 (CH; C-9); 119,1 (CH; C-10); 122,0 (CH; C-11) e 110,9 (CH; C-12) aos carbonos pertencentes ao núcleo indólico. Já os sinais em  $\delta_{\text{C}}$  32,3 (CH; C-15); 44,3 (CH; C-20) e 95,3 (CH; C-21) correspondem aos carbonos metínicos e os sinais em  $\delta_{\text{C}}$  111,3 (C; C-16); 152,7 (CH, C-17); 117,7 (CH<sub>2</sub>; C-18) e 134,7 (CH; C-19) foram atribuídos aos carbonos olefínicos da unidade secologanínica. O sinal em  $\delta_{\text{C}}$  173,9 corresponde ao grupamento carboxílico (C-22). Foi possível atribuir os três sinais de carbonos metilênicos em  $\delta_{\text{C}}$  41,6 (CH<sub>2</sub>; C-5); 18,2 (CH<sub>2</sub>; C-6) e 33,7 (CH<sub>2</sub>; C-14) e por fim, atribuiu-se os sinais em  $\delta_{\text{C}}$  99,0 (C-1'); 73,3 (C-2'); 76,6 (C-3'); 70,4 (C-4'); 77,4 (C-5') e 61,7 (C-6') ao grupamento glicosídico.

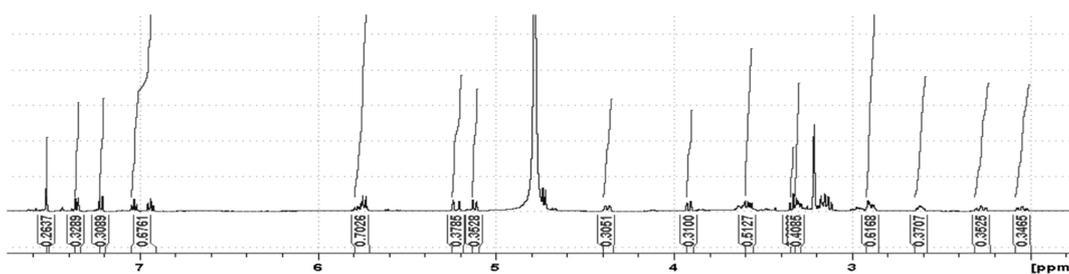


Figura 1: Espectro de RMN de  $^1\text{H}$  para a substância PS-1

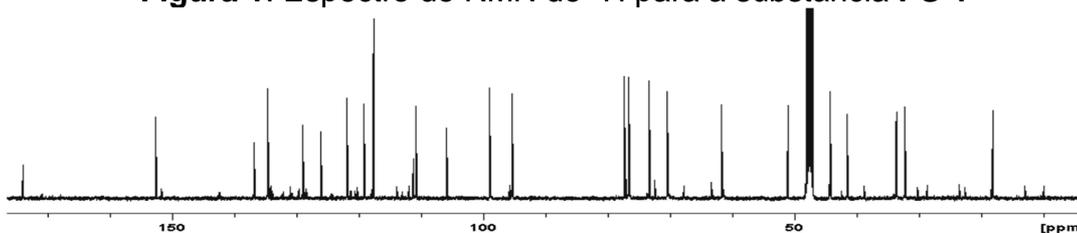
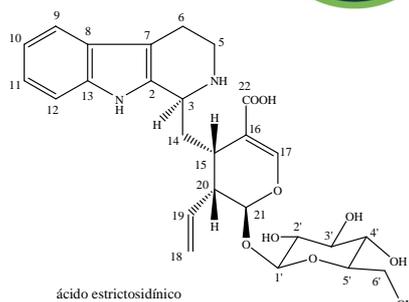


Figura 2: Espectro de RMN de  $^{13}\text{C}$  das substâncias PS-1



A substância **PS-2**, por meio dos espectros de RMN de  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$ , foi possível observar sinais semelhantes a **PS-1**, porém com sinais adicionais que caracterizam um derivado do ácido strictosidínico, no entanto, por se tratar de uma estrutura mais complexa, será necessário realizar análises complementares, como espectrometria de massas, em que encontra-se em processo.

## Conclusões

Do estudo químico da fração BuOH, das partes aéreas da espécie *Psychotria schlechtendaliana*, tornou-se possível o isolamento e elucidação do alcaloide ácido strictosidínico e de um derivado do ácido strictosidínico. O alcaloide ácido strictosidínico já foi isolado em outras espécies do gênero como *P. myriantha*, *P. minutiflora* e *P. hoffmannseggiana*, apresentando atividade analgésica periférica.

## Agradecimentos

Fundação Araucária, CNPq, UEM.

## Referências

BOTH, F. L. **Avaliação do perfil psicofarmacológico de psicolatina isolada de *Psychotria umbellata* (Rubiaceae)**. Programa de Pós-graduação em Ciências Farmacêuticas, Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Porto Alegre. p.18-21 2005. (Tese de doutorado)

MENDONÇA, A. C. A. M.; SILVA, M. A. P.; SEIXAS, E. N. C.; SANTOS, M. A. F. Rubiaceae: aspectos ecológicos e reprodutivos. **Caderno de Cultura e Ciência**, Ano VIII, v. 12, p. 9-10, 2013.

ZINI, A. S., MARTINS, S., TODERKE, M. L., TEMPONI, L. G. Anatomia foliar de Rubiaceae ocorrentes em fragmento florestal urbano de Mata Atlântica, PR, Brasil. **Hoehnea**. v. 43, p. 173-182, 2016.