

ESTUDO QUÍMICO DE *PSYCHOTRIA CAPILLACEA*: IDENTIFICAÇÃO E ISOLAMENTO DE ALCALOIDES E CONSTITUINTES MAJORITÁRIOS

Arantxa Ribeiro Miotto (PIBIC/CNPQ/UEM), Debora Cristina Baldoqui (Coorientadora), Maria Helena Sarragiotto (Orientador). E-mail: mhsarragiotto@uem.br

Universidade Estadual de Maringá, Centro de Ciências Biológicas, Maringá, PR.

Química/Química Orgânica

Palavras-chave: *Psychotria capillacea*; estudo químico; metabólitos especializados.

RESUMO

Plantas do gênero *Psychotria* (Rubiaceae) são amplamente estudadas pelas propriedades biológicas apresentadas por seus constituintes, tais como anti-inflamatória, analgésica, antimicrobiana, antiviral e antitumoral. Apesar dos diversos estudos relatados para o gênero, ainda há espécies pouco investigadas, dentre estas, a *Psychotria capillacea*. Estudos preliminares mostraram que essa espécie possui atividades antioxidantes e anticolinesterásicas, o que reforça a necessidade de aprofundar a pesquisa sobre seus metabólitos especializados. Este trabalho teve como foco o estudo de *P. capillacea*, visando isolamento e/ou identificação de alcaloides e outros metabólitos especializados presentes, a partir da utilização de desreplicação, métodos cromatográficos e espectroscópicos. O estudo resultou no isolamento do éster metílico do ácido ursólico e da loliolida, além da identificação do alcaloide quimonantina, de triterpenos, megastigmanos e taninos a partir da desreplicação das frações obtidas do fracionamento do extrato bruto de *P. capillacea*.

INTRODUÇÃO

O gênero *Psychotria* (Rubiaceae) é amplamente estudado devido à variedade de propriedades farmacológicas apresentadas por seus constituintes, incluindo atividades anti-inflamatórias, analgésicas, antimicrobianas, antivirais e citotóxicas (CALIXTO et al., 2016). Estudos químicos sobre *Psychotria* relatam a presença de alcaloides pirrolidinoindolínicos, indólicos e monoterpênicos como principais constituintes (DE CARVALHO et al., 201). Além dos alcaloides, triterpenos, flavonoides, iridóides e ácidos clorogênicos foram isolados de espécies do gênero. Apesar do extenso estudo do gênero *Psychotria*, algumas espécies, como *Psychotria capillacea*, ainda são pouco exploradas. A espécie *P. capillacea* é uma

planta nativa do Brasil e está distribuída nos estados de Amazonas, Mato Grosso do Sul, Minas Gerais, São Paulo e Paraná, além de estar presente no Paraguai e Argentina. Ocorre em floresta ciliar e se constitui na forma de arbusto de porte médio. Essa planta é popularmente conhecida como “café” (FORMAGIO et al., 2021). Estudos do extrato metanólico das folhas da *P. capillacea* indicaram que esta espécie apresenta atividade anti-inflamatória, anti-hiperalgesica e neuroprotetora (FORMAGIO et al., 2024). Outro estudo mostrou que extratos desta espécie mostraram promissora atividade antiproliferativa frente a células tumorais de ovário e glioma e inibição da acetilcolinesterase em estruturas cerebrais de ratos (VOLOBUFF et al., 2019). Desta forma, visando ampliar o conhecimento do potencial químico desta espécie, este trabalho teve como foco o estudo de *P. capillacea*, visando isolamento e/ou identificação de alcaloides e outros metabólitos especializados presentes, a partir da utilização de desreplicação, métodos cromatográficos e espectroscópicos.

MATERIAIS E MÉTODOS

Coleta da planta, obtenção e fracionamento do extrato bruto

As partes aéreas de *P. capillacea* foram coletadas em Dourados/MS, identificadas pela Profa Dra. Zefa Valdevina Pereira (UFGD). Uma exsicata (No. 5008) foi depositada no herbário da Universidade Federal de Grande Dourados e registrada no SisGen A51F665. O material seco e moído (151,90 g) foi extraído exaustivamente por maceração em metanol, a frio. O solvente foi evaporado a vácuo em evaporador rotativo, rendendo 22,3 g do extrato bruto (EB). Parte do EB (15 g) foi solubilizado em uma mistura de água e metanol 1:1 e extraído com *n*-hexano, diclorometano e acetato de etila, obtendo-se as frações hexânica (FHE; 2,90 g), diclorometano (FD; 0,75 g), acetato de etila (FAE; 2,20 g) e hidrometanólica (FHM/FHMSI; 9,01 g) após evaporação dos solventes.

Estudo das frações /Isolamento dos compostos majoritários

Parte das frações FHE (1,8 g) e FD (0,5 g) foi submetida a cromatografia em coluna (CC), usando sílica flash como fase estacionária e mistura de hexano/acetato de etila e acetato de etila/metanol, em gradiente crescente de polaridade, como fase móvel. As subfrações obtidas foram reunidas de acordo com o perfil em cromatografia em camada delgada (CCD), resultando 15 sub-frações da FHE e 10 sub-frações da FD. A FAE (1,38 g) e FHM (1,0 g) foram submetidas a CC em Sephadex LH- 20 utilizando-se água e metanol em gradiente decrescente de polaridade como fase móvel, obtendo-se 24 e 15 sub-frações, respectivamente.

Identificação dos compostos

A identificação dos compostos foi realizada com base na análise dos espectros de Ressonância Magnética Nuclear (RNN) de ^1H e ^{13}C , utilizando-se como solvente

CDCl_3 ou $\text{DMSO}-d_6$ e comparação com dados da literatura, bem como por desreplicação das frações, utilizando cromatografia líquida de ultra eficiência acoplada a espectrometria de massas de alta resolução, em inglês *ultra-high performance liquid chromatography coupled to high resolution mass spectrometry* (UHPLC-HRMS) para a aquisição de dados e *molecular networking* para análise dos mesmos.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

A análise dos dados de RMN e de desreplicação mostrou a presença de diferentes compostos em FHE, FD, FAE e FHM, evidenciando um perfil químico distinto para as frações obtidas do fracionamento do extrato bruto de *P. capillacea*. Na **Figura 1** estão apresentadas as estruturas (**1-7**), relativas aos constituintes e/ou unidades presentes nas frações. A maioria das subfrações obtidas da fração hexânica (FHE) apresentou uma mistura de ésteres graxos, confirmados pelos sinais na região de 0,70 a 2,00 ppm, correspondentes a hidrogênios metílicos e metilênicos de cadeia longa e, em δ_{H} 3,50, relativo a metoxila no espectro de RMN ^1H . Além disso, na FHE-8 foi constatada também a presença do éster metílico do ácido ursólico (**1**), principalmente pelos sinais em δ_{C} 79,1 (C-3), 125,8 (C-12), 137,9 (C-13), 55,2 (C-18) e do grupo ester em 180,9 (C=O) e 52,7 (OMe). A partir da desreplicação da fração diclorometano (FD) por UHPLC-HRMS e *molecular networking* e, comparação com dados da literatura (CECATTO et al., 2025), foi possível identificar o alcaloide quimonantina, triterpenos como o ácido ursólico (**2**) e megastigmanos como vomifoliol (**3**). Desta fração foi isolado a loliolida (**4**), cujo espectro de RMN ^1H foi consistente com a estrutura devido aos sinais das metilas em δ_{H} 1,27; 1,46 e δ_{H} 1,77, além dos hidrogênios oximetínico e vinílico em δ_{H} 4,33 e δ_{H} 5,69, respectivamente. A análise dos dados de RMN e desreplicação da fração acetato de etila (FAE) mostrou que a mesma é constituída por uma mistura de taninos, formados por unidades de catequina/epicatequina (**5**), afzelequina (**6**) e galocatequina/epigalocatequina (**7**), caracterizada pelos sinais na região de δ_{H} 8,0-9,5/ δ_{C} 150-160 (H/C fenólicos), δ_{H} 6,0-7,0/ δ_{C} 115-135 (H/C aromáticos), δ_{H} 4,0- 5,0 e δ_{H} 2,0- 3,5, relativos aos H-2, H-3 e H-4 do anel C das unidades presentes. Os dados de RMN das subfrações da FHM mostraram sinais na região de hidrogênios e carbonos carbinólicos (δ_{H} 3,0-4,0/ δ_{C} 60-80) e anoméricos (δ_{H} 5,0-5,5/ δ_{C} 90-105), evidenciando misturas de açúcares como principais constituintes.

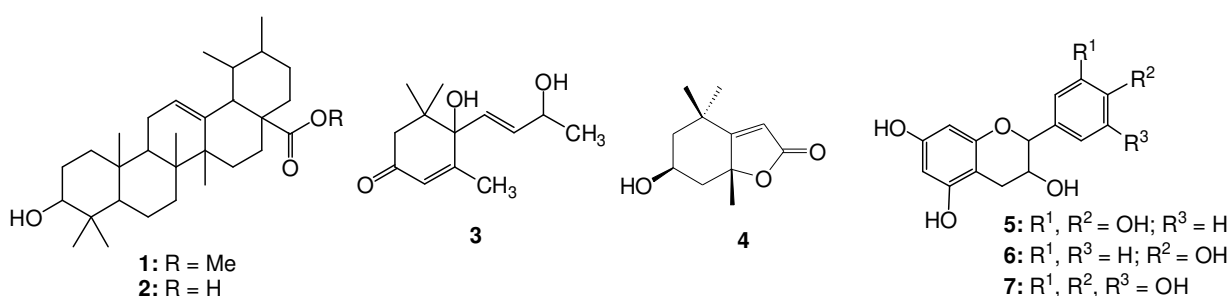


Figura 1. Estruturas dos constituintes e/ou unidades presentes nas frações de *P. capillacea*

CONCLUSÕES

O estudo da espécie *Psychotria capillacea* resultou no isolamento de ácidos graxos de cadeia longa e do éster metílico do ácido ursólico (**1**) da fração hexânica (FHE) e, da loliolida, da fração diclorometano (FD). Os compostos isolados foram identificados por técnicas espectroscópicas. A desreplicação por UHPLC-HRMS e *molecular networking* resultou na identificação da quimonantina, triterpenos e megastigmanos da fração diclorometano (FD) e, de uma mistura de taninos, da fração acetato de etila (FAE). Os resultados obtidos contribuem para ampliar o conhecimento do perfil químico do gênero *Psychotria*.

AGRADECIMENTOS

Ao CNPq, Fundação Araucária, DQI e UEM.

REFERÊNCIAS

CALIXTO, N.O. et al., The Genus *Psychotria*: Phytochemistry, Chemotaxonomy, Ethnopharmacology and Biological Properties. **J. Braz. Chem. Soc.**, v. 27, No. 8, p.1355, 2016.

CECATTO, A. J.; FORMAGIO, A. S. N.; FORTUNA, C.; BUZANELLO-MARTINS, C.; BALDOQUI, D.; CABRAL, M. R. P.; SARRAGIOTTO, M. H.; DA COSTA, W. F. Chemical and dereplication studies of *Palicourea tomentosa* (Aubl.) Borhidi and their antimicrobial and anticholinesterase activities. **Química Nova**, v. 48, n. 1, p. 1-7, 2025. DOI: <https://doi.org/10.21577/0100-4042.20250007>.

DE CARVALHO, A. R. et al., *Psychotria* Genus: Chemical Constituents, Biological Activities, and Synthetic Studies. **Studies in Natural Products Chemistry**, v. 48, p. 231, 2016.

FORMAGIO, A. S. N.; VOLOBUFF, C. R. F.; PEREIRA, Z. V.; VILELA, L. O.; VILEGAS, W. **Coletânea Científica de Espécies de *Psychotria* (Rubiaceae):** Florística e Aspectos Químicos e Farmacológicos. Atena Ponta Grossa: Ponta Grossa, Brazil, 2021.

FORMAGIO, A.S.N. et al., A Comprehensive Description of the Anatomy and Histochemistry of *Psychotria capillacea* (Müll. Arg.) Standl. and an Investigation into Its Anti-Inflammatory Effects in Mice and Role in Scopolamine-Induced Memory Impairment. **Pharmaceuticals** (Basel), v. 17, n. 5, p. 564, 2024.

VOLOBUFF, C.R.F. et al., Antitumoral and anticholinesterasic activities of the seven

34º Encontro Anual de Iniciação Científica
14º Encontro Anual de Iniciação Científica Júnior



12 e 13 de novembro de 2025

species from Rubiaceae. **Curr. Pharm. Biotechnol.**, v. 20, p. 302, 2019.