

## Sesquiterpenos do óleo volátil das folhas de *Peperomia oreophylla*

João Henrique G. Lago<sup>1,2\*</sup> (PQ), Alberto de Oliveira<sup>2</sup> (PG) e Massuo J. Kato<sup>2</sup> (PQ).

\*e-mail: joaolago@iq.usp.br

<sup>1</sup>Faculdade de Ciências Biológicas, Exatas e Experimentais, Universidade Presbiteriana Mackenzie, 01302-970 São Paulo – SP, Brasil; <sup>2</sup>Instituto de Química, Universidade de São Paulo, CP 26077, 05599-970 São Paulo – SP, Brasil

Palavras Chave: sesquiterpenos, 3-ishwarol, *Peperomia oreophylla*.

### Introdução

O gênero *Peperomia* é constituído por mais de 1000 espécies distribuídas basicamente em regiões tropicais e sub-tropicais do planeta. Apesar do extenso número de espécies, poucos são os estudos fitoquímicos descritos, os quais reportam a ocorrência de amidas, cromenos, ácidos benzóicos e lignanas, além de fenilpropanóides em óleos voláteis<sup>1</sup>. Inserido em um estudo que visa conhecer o perfil químico de espécies de *Peperomia*, descreveu-se anteriormente a ocorrência de um novo derivado, denominado 3-ishwarona no óleo volátil das folhas de *P. oreophylla*<sup>2</sup>. No presente estudo, descreve-se a caracterização do derivado 3ishwarol, também inédito, o qual foi obtido em pequena quantidade, além de diversos sesquiterpenos de ocorrência usual.

### Resultados e Discussão

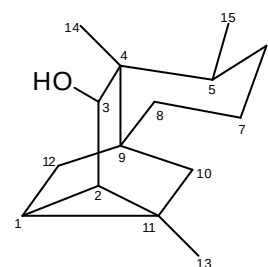
As folhas de *P. oreophylla* (245 g) foram submetidas à hidrodestilação em aparelho tipo Clevenger por quatro horas, obtendo-se 120 mg de óleo bruto (rendimento 0,05%). Parte desse material (100 mg) foi submetido a fracionamento cromatográfico em coluna de gel de sílica sob pressão, eluída com CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> e misturas de CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>:MeOH (99:1 e 9:1), obtendo-se oito frações que foram analisadas individualmente por CG. A fração 1 (10 mg) foi submetida a análise por CG/EM e cálculo do índice de Kovatz, permitindo a identificação de β-elemeno (**1**), α-ylangeno (**2**), α-guaieno (**3**) e β-selineno (**4**). As frações 5 e 6 foram purificadas individualmente através de CCDP em gel de sílica (CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>), fornecendo, respectivamente 3-ishwarona (**5** - 46 mg) e **6** (0,6 mg). A fração 7 forneceu o sesquiterpeno espatulenol (**7** - 3 mg) na forma pura.

O espectro de RMN de <sup>1</sup>H de **6** (C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>) mostrou, dentre outros sinais, dois singletos em δ 1,12 (3H) e 0,74 (3H) além de um dubleto em δ 0,89 (J = 6,6 Hz, 3H), relativos a três grupos metílicos e um singlete largo em δ 3,66 (1H), relativo a hidrogênio ligado a carbono carbinólico. Uma vez que os dados são muito similares aos da 3-ishwarona, sugeriu-se que **6** consiste no álcool correspondente, o que foi confirmado pelo EM que mostrou o pico do íon-molecular em m/z 220 Da, contendo duas unidade de massa a mais daquele observado para 3ishwarona. Uma vez que a quantidade obtida de **6** mostrou-se insuficiente para determinação estrutural, uma vez que

29ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

não foi possível o registro dos espectros de RMN de <sup>13</sup>C, maiores quantidade desse composto foram obtidas através da redução da 3-ishwarona. Para tanto, 35 mg da cetona (0,16 mmol) foram dissolvidos em THF (5 mL) e mantidos sob agitação. Nessa mistura, foram adicionados 7,6 mg de NaBH<sub>4</sub> (0,2 mmol) em MeOH, mantendo-se a mistura reacional a 27°C por 4 horas. Decorrido esse período foi realizado o *work-up* usual, obtendo-se 35 mg de 3-ishwarol (99,4%), o qual foi comparado com o produto natural através de análise via CG.

Os espectros de RMN de <sup>13</sup>C (C<sub>6</sub>D<sub>6</sub>), técnicas BBD e DEPT 135°, mostram 15 sinais, que associado ao EM, permitiu definir a fórmula molecular como C<sub>15</sub>H<sub>24</sub>O, com quatro índices de deficiência de hidrogênio. Devido à ausência de sinais relativos a carbonos sp<sup>2</sup> e carbonílicos, a estrutura molecular é tetracíclica. Através da análise das curvas de contorno HMQC e HMBC e comparação dos dados descritos para 3-ishwarona, foi possível posicionar o grupo hidroxila em C-3. A estereoquímica de C-3 foi definida através da análise do espectro NOESY. Assim, a estrutura de **6** foi definida como 3-ishwarol, inédita na literatura.



3-ishwarol (**6**)

### Conclusões

A análise da composição química do óleo volátil das folhas de *P. oreophylla* resultou na identificação de 7 sesquiterpenos (87% em massa), dois dos quais inéditos (3-ishwarol e 3-ishwarona) e apresentando um esqueleto estrutural raro.

### Agradecimentos

FAPESP e CNPq.

<sup>1</sup>Díaz, A.M.P. et al., *Planta Med.* **1988**, 54, 92.

<sup>2</sup>Lago, J.H.G. et al., Livro de Resumos da 27ª. RA da SBQ, 2004, Salvador, BA (PN-271).