Determinação da estereoquímica de diastereoisômeros isolados de *Waltheria douradinha* (Sterculiaceae) por difração de raios-X.

Vanessa Gressler* (PG)[1], Graciane Zanon (IC)[1], Ademir F. Morel (PQ)[1]. vgressler@usp.br

[1]*Universidade Federal de Santa Maria, Depto. Química, Av. Roraima, 1000, Santa Maria-RS, CEP.: 97105- 900.*

Palavras Chave: *Waltheria douradinha, difração de raios-X.*

Introdução

A espécie *Waltheria douradinha* Saint Hilaire pertence à família Sterculiaceae, que compreende cerca de 68 gêneros e 1100 espécies distribuídas nas regiões tropicais e subtropicais. No Brasil, ocorrem 11 gêneros e 115 espécies, sendo a *W. douradinha* a espécie mais representativa por suas propriedades medicinais[1]. Conhecida popularmente por douradinha do campo suas folhas e flores, em infusão, são utilizadas internamente para combater bronquite, laringite, amolecer tumores, e externamente para lavar feridas, principalmente as de origem sifílicas[2,3].

Estudos bibliográficos mostram que representantes deste gênero, são ricos em alcalóides, particularmente os pertencentes às classes dos ciclopeptídicos e das quinolonas. Estes, em sua grande maioria, apresentam atividade antimicrobiana, o que motiva o estudo fitoquímico desta espécie.

Este trabalho apresenta a determinação da estereoquímica através da difração de raios-X de dois alcalóides quinolônicos isolados de *W. douradinha*.

Resultados e Discussão

A espécie *Waltheria douradinha* foi coletada em São Pedro – RS, seca em estufa a 25°C por três dias e pulverizada. Este material foi particionado em raiz, o caule, a folha e flor. O extrato metanólico da raiz foi suspenso em água e fracionado, primeiramente em hexano a pH neutro e em seguida com éter etílico a pH 2. Após, a fração aquosa remanescente foi alcalinizada a pH 9 e extraída com éter etílico e acetato de etila.

A fração etérea básica foi cromatografada em coluna de sílica gel usando diclorometano e metanol em ordem crescente de polaridade como eluente. Desta coluna obteve-se 455 subfrações e das frações 257-291 isolou-se o alcalóide Waltheriona-A (W-A), já das frações 292-340 isolou-se o alcalóide Waltheriona-B (W-B). As estruturas dos alcalóides isolados foram determinadas por métodos espectroscópicos de RMN ^{1}H e ^{13}C uni e bidimensionais e espectrometria de massas.

Para a determinação da estereoquímica das substâncias, cristalizou-se a substância W-A em éter diisopropílico/metanol, já para a obtenção de cristais de W-B foi necessário realizar uma reação de metilação com CH_3Br/NaH. Os cristais obtidos foram analisados por Difração de Raios-X.

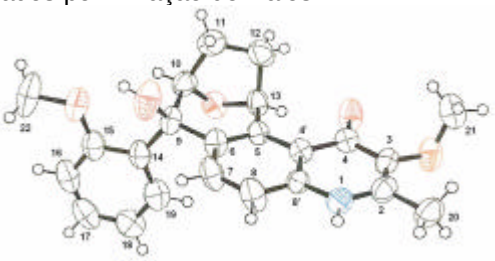

Figura 1 Estrutura e estereoquímica obtida por Difração de Raios-X de Waltheriona-A.

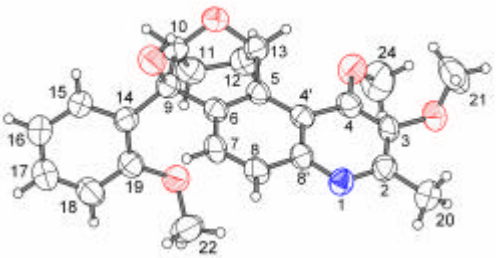

Figura 2 Estrutura e estereoquímica obtida por Difração de Raios-X de Waltheriona-B.

Conclusões

Os resultados obtidos por Difração de Raios-X provaram que os dois alcalóides isolados são diastereoisoméricos, ou seja, diferenciam-se apenas na posição espacial do oxigênio do biciclo ligado aos carbonos 10 e 13. O alcalóide W-A apresentou estereoquímica relativa 9*R*, 10*S*, 13*R* (*anti*) e o W-B apresentou 9*R*, 10*R*, 13*S* (*syn*).

Agradecimentos

Prof. Dr. Robert A. Brown, SCT do RS, CAPES e CNPq.

[1] Hoehne, F. C.; *Plantas e Substâncias Vegetais Tóxicas e Medicinais* Graphicars-São Paulo **1939**, 191-193.
[2] Schultz, A.: *Introdução a Sistemática* v. II, 5 ªed Porto Alegre, Ed. Da UFRGS **1985**, 199-202.
[3] Bhat, K.L.; Joullie, M. M.: *J. Chem. Educ.*, **1987**, 64, 21.