

Constituintes químicos dos tubérculos de *Sinningia aggregata*.

Andersson Barison (PQ), Maria Helena Verdan (IC) e Maria Élide Alves Stefanello (PQ)*
elida@ufpr.br

Departamento de Química – Universidade Federal do Paraná.

Palavras Chave: Gesneriaceae, *Sinningia aggregata*, esteroides, antraquinona, naftaleno derivado.

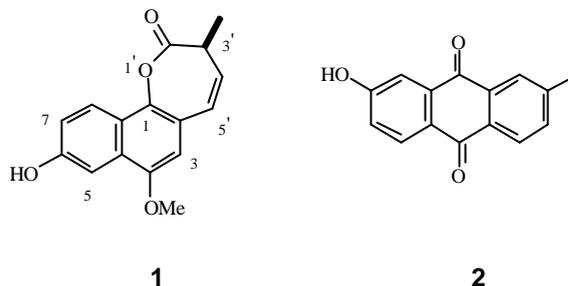
Introdução

Sinningia aggregata (Ker Gawl) Wieler (Gesneriaceae) é uma erva aromática de tubérculo perene, amplamente dispersa nas regiões Sul e Sudeste do Brasil. A composição do seu óleo essencial já foi estudada¹. Além disso, em uma comunicação anterior relatamos a atividade antimicrobiana de vários extratos e o isolamento de duas substâncias². O trabalho atual apresenta os resultados do estudo fitoquímico dos tubérculos dessa espécie, o qual resultou no isolamento das substâncias **1** e **2**. As substâncias isoladas foram elucidadas/identificadas através de análises de IV, EM, RMN, bem como, comparação com dados da literatura.

Resultados e Discussão

O material vegetal, coletado em Curitiba/PR, seco e moído foi extraído com etanol. O extrato resultante foi submetido a sucessivas partições e purificações cromatográficas, resultando no isolamento das substâncias **1** e **2**, além de uma mistura dos esteróides β -sitosterol e estigmasterol. O espectro de RMN de ¹H de **1** mostrou sinais de 4 hidrogênios aromáticos (δ 6,56-8,22 ppm), de um grupo metoxila (δ 3,98 ppm, s), de um grupo hidroxila (δ 5,40 ppm, sl) e de um grupamento CH₃-CH=CH (δ 1,53, d; 2,80 ddq; 5,73 dd e 6,80 ppm, dd). O espectro de RMN de ¹³C apresentou 16 sinais, dos quais dez eram característicos de um anel naftaleno substituído, enquanto que o espectro DEPT 135 mostrou a ausência de grupos metileno. A presença de uma carbonila de éster foi observada nos espectros de IV (1717 cm⁻¹) e de RMN de ¹³C (δ 171,1 ppm). Através de minuciosa análise dos experimentos bidimensionais de RMN (HSQC e HMBC) a estrutura do novo produto natural **1** foi determinada. O espectro de massas de alta resolução também está de acordo com a estrutura proposta ([M]⁺ 270,1131, compatível com C₁₆H₁₄O₄). Embora tenha um esqueleto carbônico não usual, a sua biossíntese pode ser racionalizada como segue: formação do naftaleno por ciclicização de 5 unidades de acetil-CoA, hidroxilação do naftaleno na posição 1 e prenilação na posição 2, seguida da oxidação de um dos grupos metila da unidade prenila a ácido carboxílico e finalmente, uma esterificação intramolecular.

O espectro de RMN de ¹H de **2** mostrou a presença de 6 hidrogênios aromáticos, com deslocamentos químicos típicos de uma antraquinona com apenas uma substituição em cada anel ³ e também de um singlete em δ 2,53 ppm, integrando para três hidrogênios, característico de um grupo metila ligado a um anel aromático. O espectro de RMN de ¹³C mostrou sinais de 15 carbonos, incluindo dois grupos carbonila (δ 182,7 e 184,1 ppm), característicos de uma antraquinona. A análise dos experimentos de HSQC e HMBC permitiu a dedução da estrutura **2**. A comparação com dados da literatura confirmou a estrutura proposta. Esta substância já foi isolada de *Rubia tinctorum* (Rubiaceae)⁴, no entanto, este é o primeiro relato de sua ocorrência na família Gesneriaceae.



Conclusões

Foi isolado e identificado, um produto natural inédito, derivado do naftaleno (**1**), e uma antraquinona conhecida (**2**), porém inédita na família Gesneriaceae, além dos esteróides β -sitosterol e estigmasterol.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao Prof. Dr. Armando Carlos Cervi pela identificação da planta e ao Prof. Dr. Marcos N. Eberlin pelos dados de EM.

¹ Stefanello, M.E.A.; Wisniewski Jr, A.; Cervi, A.C. *Revista Bras. Farmacognosia* **2005**, 15, 331.

² Salvador, M.J.; Ito, I.Y.; Wisniewski Jr, A. e Stefanello, M.E.A. 28^a. RA da SBQ, PN-147.

³ Francis, G.W.; Aksnos, D.W. e Holt, O. *Magn. Reson. Chem.* **1998**, 36, 769.

⁴ Kawasaki, Y.; Goda, Y.; Yoshihira, K. e Noguchi, H. *Shoyakugaku Zasshi* **1990**, 44, 95.