



ESTUDO DOS CONSTITUINTES QUÍMICOS DAS RAÍZES DE *Salacia grandifolia* (CELASTRACEAE)

Luiz Carlos de C. Farias¹(G) *, Leila R. Oliveira¹(PG), Diogo M. Vital¹(PQ), Lucienir P. Duarte¹(PQ), Grasiely F.de Sousa¹(PQ) *

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais, Avenida Presidente Antônio Carlos, 6627, Pampulha, 31270- 901, Belo Horizonte-MG, Brazil

Luizcarlosfarias517@gmail.com, grasielysousa@ufmg.com

RESUMO

A família Celastraceae é considerada uma fonte abundante de triterpenos quinonametídeos, compostos naturais associados a diversas atividades biológicas, como propriedades antiangiogênicas, antitumoral, antiviral e antiinflamatória¹. Essa classe de compostos é considerada um marcador químico da família Celastraceae e é encontrada nas raízes. A espécie *Salacia grandifolia* pertence à família Celastraceae e pode ser encontrada em áreas de Mata Atlântica no Brasil. Porém, não há registros de estudos fitoquímicos das raízes dessa espécie. Para isolar constituintes químicos das raízes, foi utilizado 1 kg de material vegetal seco. O extrato foi preparado usando uma mistura de hexano e éter etílico na proporção 1:1 em um aparelho Soxhlet. Durante a remoção parcial do solvente no rotaevaporador, um sólido laranja, o qual foi filtrado a vácuo. O sobrenadante, referido como EHER (extrato hexano-éter das raízes), foi utilizado para este trabalho. Sucessivas purificações cromatográficas em coluna de sílica gel e cromatografia em camada preparativa resultaram no isolamento dos seguintes compostos: pristimerina (449,0 mg), 3-oxo-29-friedelano (7,4 mg), escutionina αA (14,0 mg) e escutinina αB (3,0mg). As estruturas dos compostos foram determinadas por meio de análises de RMN de ^{13}C e 1H e, posteriormente, comparadas com dados disponíveis na literatura.

Palavras-chave: Pristimerina, 3-oxo-29-hidroxi-friedelano, Escutionina αA , Escutionina αB , Celastraceae

Introdução

Desde tempos remotos até os avanços científicos contemporâneos, os compostos bioativos presentes em espécies vegetais desempenharam um papel crucial na evolução das abordagens terapêuticas. Esses metabólitos secundários, também conhecidos como fitoconstituintes, são classificados como produtos químicos elaborados pelas plantas como parte de suas respostas adaptativas às influências ambientais. Eles exibem propriedades intrínsecas de interesse farmacêutico e, desempenham uma função significativa na proteção e adaptação em ambientes adversos (Barbosa et al., 2017).

Entre as várias famílias de espécies botânicas investigadas, a família Celastraceae se destaca pela diversidade de fitoconstituintes com potencial atividade biológica. Com aproximadamente 98 gêneros e 1264 espécies espalhadas por quase todo o mundo, a família Celastraceae é encontrada nos trópicos e subtropicais, com poucos representantes nas regiões temperadas. As principais classes de substâncias isoladas incluem triterpenos, alcaloides, flavonoides e esteroides glicosilados (Duarte, 2013). Entre esses compostos, os triterpenos pentacíclicos são especialmente relevantes devido às suas atividades citotóxica, antioxidante, antibacteriana, entre outras (Camargo et al., 2022).

A espécie *Salacia grandifolia* pertence à família Celastraceae e o gênero *Salacia* conta com aproximadamente 200 espécies distribuídas em regiões tropicais, tais como América do Sul, Índia e China. Espécies desse gênero são utilizadas na medicina tradicional de diversos países do sudeste Asiático como anti-inflamatório e para o tratamento do diabetes (Santos et al., 2020). Ainda não havia relatos na literatura do estudo fitoquímico das raízes de *S. grandifolia*.

Experimental

Coleta e identificação do material vegetal

As raízes e galhos de *Salacia grandifolia* foram coletadas no município de Embu-Guaçu, São Paulo, em dezembro de 2020, pelo professor Dr. Guilherme de Medeiros Antares, do Departamento de Ciências Agrárias e Biológicas da Universidade Federal do Espírito Santo – Campus São Mateus.

Extração

As raízes foram secas em temperatura ambiente e posteriormente processadas em moinho de martelos. As raízes pulverizadas foram pesadas (1 kg) e submetidas à extração a quente empregando aparelho Soxhlet e utilizando uma mistura 1:1 de hexano e éter etílico.

Isolamento e identificação de constituintes do extrato hexano-éter das raízes.

Durante o preparo do extrato hexano-éter etílico ocorreu a precipitação de um sólido que foi filtrado e armazenado em freezer (3,46 g). O sobrenadante teve o solvente removido em evaporador rotatório, resultando em 5,86 g de extrato. Realizou-se uma purificação do sobrenadante do extrato hexano-éter etílico resultante (5,86 g) por cromatografia em coluna (CC) empregando sílica gel 70-230 mesh e hexano e acetato de etila como eluentes. Obtiveram-se 16 grupos reunidos de acordo com perfil por CCD. A identificação dos compostos isolados foi realizada por meio da técnica de RMN de 1H e ^{13}C utilizando o espectro de buker avance



Neo (600MHz) do laboratório de Ressonância Magnética de Alta Resolução(LAREMAR) do departamento de química da UFMG.

Resultados e Discussão

A partir do fracionamento do extrato éter-hexano dos galhos foi possível isolar por meio de múltiplas colunas cromatográficas e caracterizar quatro triterpenos, sendo eles, pristimerina (425,5 mg), 3-oxo-29-hidroxifriedelano(7,6 mg) e os dímeros de pristimerina, escutionina α A e α B (3 mg e 4 mg, respectivamente). A determinação estrutural dos compostos foi realizada a partir da comparação dos dados de RMN de C^{13} com dados da literatura (Camargo et al., 2022). Os espectros de RMN de H^1 da escutionina α A e da escutionina α B são semelhantes, visto que os compostos são isômeros. Ambos os espectros apresentam dois simpletos na região de δ^H 3,50 a 3,70 ppm, relativos a metoxilas, além de sinais na região de hidrogênios aromáticos (δ^H 6,00 a 7,00 ppm) de hidrogênios ligados a carbonos de duplas ligações conjugadas (δ^H 5,00 a 6,00 ppm). No espectro de 1H da escutionina α A foram observados onze simpletos na região de metilas (δ^H 0,53; 0,87; 0,99; 1,05; 1,06; 1,11; 1,17; 1,20; 1,25; 1,41; 1,53 ppm) e dois simpletos característicos de grupo metoxila em δ^H 3,58 e 3,67 ppm. Também foram observados um simpleto em δ^H 2,05 ppm (característico de metila ligada a anel aromático); um simpleto em δ^H 6,69 ppm (característico de hidrogênio ligado a anel aromático) e um simpleto em δ^H 4,90 ppm (característico de hidrogênio de hidroxila de hemiacetal). Esses dados, quando comparados com dados da literatura, permitiram identificar a escutionina α A. O espectro de RMN de 1H da escutionina α B apresentou um perfil semelhante ao seu isômero, com 11 simpletos na região de metilas (δ^H 0,56; 0,80; 0,98; 1,04; 1,06; 1,10; 1,17; 1,25; 1,41; 1,54; 1,57 ppm), dois simpletos na região de metoxilas (δ^H 3,61 e 3,62 ppm), um simpleto em δ^H 6,48 e outro em δ^H 2,30 ppm, relativos, respectivamente, a hidrogênio e metila ligados a anel aromático. Também observou-se um simpleto em δ^H 4,98 ppm relativo à hidroxila de hemiacetal. A comparação com dados da literatura permitiu identificar o composto como sendo a escutionina α B. O espectro de RMN de 1H da pristimerina apresentou um sinal em δ^H 3,5 ppm, pertencente a um grupo metoxila, além de sinais de hidrogênios dos anéis A e B (δ^H 7,03; 6,54 e 6,35 ppm) ligados a carbonos de duplas ligações conjugadas. Já o espectro de RMN de ^{13}C tem sinais de carbonila, relativos às carbonilas 2 e 29 (δ^C 178,3 e 178,7 ppm, respectivamente) e sinais de carbono conjugados dos anéis A e B na região de δ^C 117,0 a 170,0 ppm. O espectro de RMN de 1H da 29-hidroxifriedelano-3-ona apresentou dois sinais em δ^H 3,29 e 3,25 ppm, correspondentes aos hidrogênios do carbono 29, que está hidroxilado, além de seis simpletos relativos a seis metilas e um duplete sobreposto a um simpleto referente à metila 23, característica dos friedelanos. O RMN de ^{13}C mostra um sinal de carbonila em δ^C 213 ppm, um sinal da metila 23 em 6,83 ppm, deslocado devido ao efeito da carbonila no C-3, típico dos friedelanos, e um sinal em 74,78 ppm, característico de um carbono ligado a hidroxila. Estudos bibliográficos mostram que os compostos escutionina α A, escutionina α B, 3-oxo-29-hidroxifriedelano e pristimerina demonstraram notável atividade biológica, destacando-se pela ação antimicrobiana, citotóxica e inibitória enzimática. As escutioninas α A e α B exibiram efeito inibitório significativo contra microrganismos Gram-positivos e Gram-negativos, além de inibição da levedura *Candida albicans*, com determinação das concentrações inibitórias mínimas (MIC) em meio líquido. O 3-oxo-29-hidroxifriedelano apresentou boa atividade na inibição da enzima acetilcolinesterase, avaliada pelo método de bioautografia, sugerindo seu potencial para aplicações no tratamento de distúrbios neurodegenerativos. A pristimerina, por sua vez, demonstrou potente efeito antiproliferativo em linhagens tumorais humanas (HeLa e Hep-2), conforme evidenciado pelo ensaio de redução do MTT. Os resultados indicam que esses compostos possuem promissora atividade terapêutica, com potencial para o desenvolvimento de novos agentes antimicrobianos, antitumorais e inibidores enzimáticos.



Figura 1 e 2: pristimerina , 3-oxo-29-hidroxifriedelano

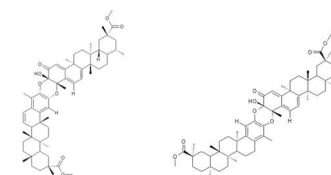


Figura 3 e 4: escutionina α A, escutionina α B

Conclusões

O estudo demonstrou que o extrato trabalhado apresenta potencial para o isolamento de metabolitos secundários da classe dos terpenos com potencial atividade biológica

Agradecimentos

CNPq, CAPES, FAPEMIG

Referência

- BARBOSA, H. M.; ALBINO, A. M.; CAVALCANTE, F. S.; LIMA, R. A. South American Journal of Basic Education, Technical and Technological, p. 30-41, 17 jul. 2017.
- CAMARGO, K. C et alMolecules 2022, 27(3), 959.
- DUARTE, M. C.. Universidade Federal da Paraíba, 2013.
- DUARTE, L. P.; FIGUEIREDO, R. C.; DE SOUZA, G. F.; SOARES, D. B. S.; RODRIGUES, S. B. V.; SILVA, F. C; SILVA, G. D. F.. Química Nova, 22 (4), p. 900-903, 2010.
- SANTOS, J. P. DOS; COELHO, W. X. O.; VIEIRA-FILHO, S. A.; PEREIRA, R. C. G.; SOUSA, G. F. DE; GOUVEIA, V. A.; SABINO, A. DE P.; EVANGELISTA, F. C. G.; TAKAHASHI, J. A.; MOURA, M. A. F.; ALMEIDA, F. B.; DUARTE, L. P.
- Química Nova, v. 43, n. 5, p. 558–567, 2020. PEREIRA, R. C. G.; EVANGELISTA, F. C. G.; SANTOS JR., V. S.; SABINO, A. P.; MALTAROLLO, V.; FREITAS, R. P.; DUARTE, L. P.; Chem. Biodiversity 202.