

# BISNORNEOLIGNANO DE LA MADERA DE *Ocotea simulans*

A. M. Puentes de Díaz.

Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, A.A. 14490, Santafé de Bogotá, Colombia.

**Keywords:** *Ocotea simulans*; *Lauraceae*; bisnorneolignan; eugenol;  $\beta$ -sitosterol.

## RESUMEN

Del extracto etanólico de la madera de *Ocotea simulans* además de eugenol y  $\beta$ -sitosterol, un nuevo compuesto rel-(7S,8S)-4-hidroxi-7'-oxo-8.3',7.O.4'-8',9'-bisnorneolignan fue aislado. Las estructuras fueron determinadas por métodos espectroscópicos y por comparación con datos de la literatura.

## ABSTRACT

From the ethanolic extract of the wood of *Ocotea simulans* in addition to eugenol and  $\beta$ -sitosterol, a new compound rel-(7S,8S)-4-hydroxy-7'-oxo-8.3',7.O.4'-8',9'-bisnorneolignan was isolated. The structures were determined by spectroscopic methods and by comparison with literature data.

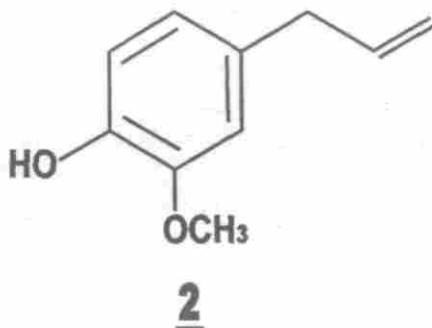
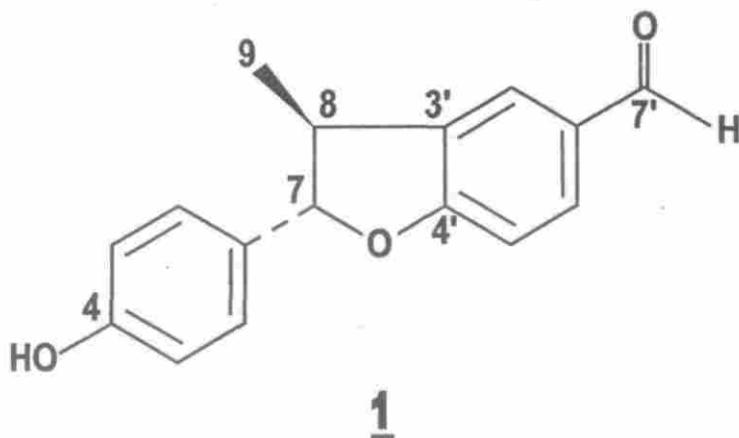
## INTRODUCCIÓN

En Colombia las maderas de especies del género *Ocotea* (*Lauraceae*) se conocen con los nombres de "aguacatillo", "amarillo", "jigua", "comino" y "laurel" y se usan ampliamente en la industria de la construcción (1-3). El potencial económico de este género radica además, en el aceite esencial de algunas especies, entre las cuales son explotadas industrialmente *O. caparrapi* (Nates) Dugand, de la cual se extrae el aceite medicinal constituido por compuestos  $C_6$ ,  $C_7$ ,  $C_8$ ,  $C_9$  y por terpenos (4,5) y *O. pretiosa* (Nees) Mez., rica en safrol y metileugenol (5,6).

Químicamente el género *Ocotea* es conocido como fuente de compuestos biológicamente activos tales como alcaloides bencilisoquinolínicos (7,8) y lignoides (9).

Glaziovina es un alcaloide proaporfínico de la corteza de *O. glaziovii* Mez. y de *Annona purpurea* L. (*Annonaceae*) con uso terapéutico patentado como ansiolítico, sedante, anticonvulsivo y relajante muscular (10). Los indios Kofan de Ecuador y de Colombia usaban el fruto de *O. venenosa* como veneno para sus flechas; esta especie contiene los alcaloides rodiasina y nor-rodiasina (8,11).

Entre los lignoides se destacan por su acción antitumoral y citotóxica los neolignanós (9,10,12) y es por esta potencial actividad, la importancia de la investigación de la madera de *O. simulans* C. K. Allen, de la cual se aisló y caracterizó el nuevo compuesto natural *rel*-(7*S*,8*S*)-4-hidroxi-7'-oxo-8.3',7.O.4'-8',9'-bisnorneolignano **1**, eugenol **2** y  $\beta$ -sitosterol.



## PARTE EXPERIMENTAL

El material vegetal fue colectado en el Bosque de Yotoco, Departamento del Valle, Colombia. La identificación botánica como *Ocotea simulans* C. K. Allen fue hecha por el doctor O. Rangel del Instituto de Ciencias Naturales, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá. Un espécimen reposa en el Herbario Nacional Colombiano (COL No.291087).

El extracto etanólico (16 g) de la madera (1440 g) fue sometido a cromatografía en columna sobre sílica gel (250 g) usando como eluyentes éter de petróleo, tolueno y acetato de etilo puros y en mezclas de polaridad creciente. Elución con éter de petróleo dio sucesivamente una mezcla de grasas (470 mg),  $\beta$ -sitosterol (800 mg) y eugenol **2** (60 mg); por elución con tolueno-acetato de etilo (1:1) se obtuvieron 23 mg del bisnorneolignano **1**.

rel-(7S, 8S)-4-Hidroxi-7'-oxo-8.3',7.O.4'-8',9'-bisnorneolignano **1**. Aceite. IR  $\gamma_{\text{max}}^{\text{película}}$   $\text{cm}^{-1}$ : 3400, 3050, 2990, 1700, 1630, 1530, 1498, 1468, 1380, 1260, 1190, 1130, 950, 850. RMN  $^1\text{H}$  (300 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  1.44(d, J=6.9 Hz, 3H-9), 3.40-3.60(m, H-8), 3.75(s, OH), 5.21(d, J=9.0 Hz, H-7), 6.93(d, J=8.7 Hz, H-2, H-6), 6.86(d, J=8.7 Hz, H-3, H-5), 7.28(d, J=8.4 Hz, H-5'), 7.72(m, H-2', H-6'), 9.86(s, H-7'). RMN  $^{13}\text{C}$  (75.42 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  136.76(C-1), 127.83(C-2, C-6), 115.67(C-3, C-5), 156.20(C-4), 93.84(C-7), 44.40(C-8), 17.92(C-9), 124.61(C-1'), 109.80(C-2'), 131.72(C-3'), 162.50(C-4'), 120.2(C-5'), 115.67(C-6'), 190.77(C-7'). EM 70 eV, m/z(int. rel.): 254(100), 253(8), 239(12), 225(11), 134(5), 121(22), 107(57).

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La fórmula molecular de **1** fue determinada por el EM de baja resolución [ $M^+$  254(100)] y por el análisis de los espectros de RMN como  $\text{C}_{16}\text{H}_{14}\text{O}_3$ . La presencia de un sistema AA'BB' en el espectro de RMN  $^1\text{H}$  del compuesto **1** fue sugerido por las dos señales dobles (J= 8.7 Hz) en  $\delta$  6.86 y en  $\delta$  6.93; en este espectro también existe el sistema AMX<sub>3</sub>: **A** está representada por una señal doble en  $\delta$  5.21 (d, J= 9.0 Hz) y corresponde al hidrógeno sobre el C-7 (RMN  $^{13}\text{C}$ :  $\delta$  93.84); la señal múltiple en  $\delta$  3.40-3.60 es del protón metínico **M** sobre C-8 ( $\delta$  44.40) y **X**<sub>3</sub> es evidente por la señal en  $\delta$  1.44 (d, J= 6.9 Hz) que integra para tres protones sobre C-9 ( $\delta$  17.92); los desplazamientos de este último sistema sugieren una estructura *trans*-7,8 (aril/metil) dihidrobenzofurano caracterizada por un  $\delta > 0.9$  para los H-9,  $J_{\text{H-7,H-8}}$  9-9.2 Hz en contraposición al desplazamiento de los mismos protones de compuestos con configuración relativa *cis*-7,8 (aril/metil) los cuales aparecen a campo alto en  $\delta < 0.9$ ,  $J_{\text{H-7,H-8}}$  9-11 Hz (9, 13, 14). Los datos anteriores, la presencia de un hidroxilo en la molécula



(IR: 3.400  $\text{cm}^{-1}$  y RMN  $^1\text{H}$ :  $\delta$  3.75 que disminuye su intensidad al adicionar  $\text{D}_2\text{O}$  a la muestra) junto con el EM el cual muestra un ion en  $m/z$  134 permiten sugerir una parte estructural  $\text{C}_6\text{C}_3$  en el compuesto 1.

En la segunda unidad estructural de la molécula se encuentra el grupo CHO (IR: 1700  $\text{cm}^{-1}$ ; RMN  $^1\text{H}$ :  $\delta$  9.86; RMN  $^{13}\text{C}$ :  $\delta$  190.77) cuya pérdida en el EM origina el pico en  $m/z$  225. A esta parte de la molécula corresponden los protones en  $\delta$  7.72 (m, H-2', H-6') en posición *orto* al grupo formilo y el H-5' representado por la señal doble en  $\delta$  7.28 ( $J = 8.4$  Hz).

Por todo lo anterior, por el EM con interpretación similar a la de compuestos relacionados estructuralmente (9), (figura 1), y por la comparación con datos espectroscópicos y configuraciones relativas publicadas para moléculas semejantes aisladas de *Ocotea porosa* (14), se concluye que 1 corresponde a rel-(7S,8S)-4-hidroxi-7'-oxo-8.3', 7.0.4'-8',9'-bisnorneolignano.

Eugenol 2 y  $\beta$ -sitosterol fueron identificados por comparación directa a través de cromatografía, IR y RMN con muestras auténticas.

## AGRADECIMIENTOS

A COLCIENCIAS por la financiación y al Dr. P. Joseph-Nathan, del Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional de México por los espectros de RMN.

## BIBLIOGRAFÍA

1. Pérez Arbeláez, E. *Plantas útiles de Colombia*. Librería Colombiana Camacho Roldán, Bogotá, 441, 1956.
2. Acero, L. E. *Principales plantas útiles de la Amazonia Colombiana*. Proyecto Radargramétrico del Amazonas. Editora Guadalupe Ltda., Bogotá, 1979.
3. Acero, L. E. *Propiedades, usos y nominación de especies vegetales de la Amazonia colombiana*. Corporación Araracuara, Dainco, Convenio Colombo - Holandes, Bogotá, 1982.
4. De Díaz, A. M. P.; Díaz, P. P.; Joseph-Nathan, P. *Rev. Latinoamer. Quim.* 1991, 22, 60.

5. Gupta, M. P. (ed.). *270 Plantas Medicinales Iberoamericanas*. Convenio Andrés Bello, CYTED, SECAB. Editorial Presencia Ltda., Santafé de Bogotá, 1995, 337.
6. Rizzini, C. T.; Mors, W. B. *Botanica Economica Brasileira*. Editora da Universidade de Sao Paulo, S. P., 1976, 119.
7. Bernal, H. Y.; Correa, J. E. *Especies Vegetales Promisorias de los Países del Convenio Andrés Bello*, SECAB, España, CAF. TOMO X. Editora Guadalupe Ltda., Santafé de Bogotá, D. C., 1994, 227.
8. Bick, R. C.; Sinchai, W. *Heterocycles*, 1978, 9, 903.
9. Gottlieb, O. R. *Prog. Chem. Org. Nat. Prod.* 1978, 35, 1.
10. Gottlieb, O. R.; Mors, W. B. *J. Agric. Food. Chem.* 1980, 28, 196.
11. Scattone Ferreira, Z. M. G. *Tesis*, Universidade de Sao Paulo, Brasil, 1979.
12. MacRae, W. D.; Towers, G. H. N. *Phytochemistry*, 1984, 23, 1207.
13. Yañez, X.; Díaz, A. M. P. de; Díaz, P. P. *Phytochemistry*, 1986, 25, 1953.
14. David, J. M.; Yoshida, M.; Gottlieb, O. R. *Phytochemistry*, 1994, 36, 491.