

CANTINONA DE *SIMABA POLYPHYLLA* (CAVALC.) THOMAS (SIMAROUBACEAE).

Lenise Socorro B. de MESQUITA-SAAD¹, José Augusto da Silva CABRAL²

RESUMO — Uma cantin-2,6-diona (**1**) foi isolada do extrato etanólico da madeira de *Simaba polyphylla* (Cavalc.) Thomas coletada próximo a Manaus. O composto **1** foi previamente isolado de *S. multiflora*, *S. guianensis* e *S. cedron*, sendo essa a primeira citação de ocorrência em *S. polyphylla*.

Palavras-chave: *Simaba polyphylla*, Simaroubaceae, cantin-2,6-diona.

Canthinone of *Simba polyphylla* (Cavac.) Thomas (Simaroubaceae).

ABSTRACT — A canthin-2,6-dione (**1**) was isolated from the ethanol extract wood of *Simaba polyphylla* (Cavalc.) Thomas collected near Manaus. Compound **1** was previously isolated from *S. multiflora*, *S. guianensis* and *S. cedron*, this is the first occurrence in *S. polyphylla*.

Key-Words: *Simaba polyphylla*, Simaroubaceae, canthin-2,6-dione.

INTRODUÇÃO

A família Simaroubaceae é constituída de aproximadamente seis subfamílias, contendo cerca de trinta e dois gêneros, com aproximadamente duzentas espécies (ENGLER, 1931; CRONQUIST, 1968), de distribuição tipicamente neotropical.

Grande parte destas espécies são utilizadas popularmente com diversos propósitos, sendo investigada sua utilização como antineoplásico, inseticida, antiviral, anti-inflamatório, antimalárico, amebicida e antifúngico (SUFFNESS & DOUROS, 1979; PIERRE *et al.*, 1980; HALL *et al.*, 1983; CABRAL *et al.*, 1993).

A família é caracterizada pela produção de triterpenos degradados (quassinóides) e por alcalóides indólicos do tipo cantinona; além destes encontram-

se também com frequência quinonas e triterpenos.

Como parte de esforço no conhecimento da química e atividade biológica do gênero, foi estudada a madeira de *Simaba polyphylla* (Cavalc.) Thomas, coletada na estrada Manaus/Boa Vista, Km 60, que tem por “habitat” a terra firme. *S. polyphylla* é conhecida popularmente como “serve-para-tudo” e “marupazinho” e é usada no tratamento de febres (CAVALCANTE, 1983).

MATERIAL E MÉTODOS

Material: *S. polyphylla* foi coletada próximo a Manaus em dezembro de 1990, e sua exsiccata arquivada no herbário do INPA, Manaus/Am, sob registro 161.807.

Isolamento e Identificação da Cantin-2,6-diona: A madeira seca

¹ Departamento de Medicamentos e Alimentos, Curso de Farmácia, Faculdade de Ciências da Saúde, Universidade do Amazonas, Rua Alexandre Amorim, 330, 69010-300, Manaus, Amazonas, Brasil.

² Coordenação de Pesquisas em Produtos Naturais, Instituto Nacional de Pesquisas da Amazônia, Caixa Postal 478, 69083-000, Manaus, Amazonas, Brasil.

(2.800 g), foi moída e submetida a extração à quente, exaustiva e sucessivamente com hexano e etanol em aparelho Soxhlet semi-industrial em aço inox, fornecendo 16,5 g (0,6%) de extrato hexânico e 36,0 g (1,3%) de extrato etanólico. O extrato etanólico foi cromatografado em coluna filtrante de sílica gel 60, usando-se hexano, benzeno, clorofórmio e metanol. A fração metanólica (32,3 g) foi solubilizada em benzeno à frio, fornecendo 1,3 g de material solúvel e 31,0 g de material insolúvel. O material insolúvel foi submetido a separação cromatográfica em coluna de sílica gel 60 com diclorometano, diclorometano:metanol e metanol. As frações eluídas com diclorometano/metanol 94:6 (1,2 g) e diclorometano/metanol 93:7 (0,4 g), após separação cromatográfica em sílica gel 60 com hexano:acetona, acetona, acetona:metanol e metanol forneceram 0,3 g de cantin-2,6-diona. A identificação da cantin-2,6-diona foi feita com base nos seus dados espectrométricos (IV, EM, RMN¹H, RMN¹³C). As demais frações revelaram-se muito complexas e em quantidade reduzida.

CONCLUSÕES

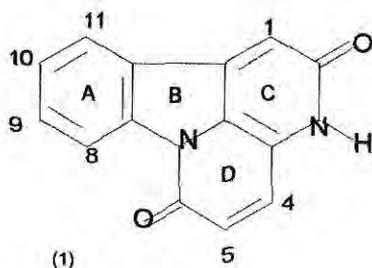
I apresentou-se como sólido amarelo amorfo, após cristalização com metanol revelou fluorescência azul sob luz ultra-violeta (UV), alto ponto de fusão (313 a 315°C) e baixa solubilidade frente a solventes orgânicos comuns. No espectro de ressonância magnética nuclear protônica (RMN¹H) a 300MHz em dimetilsulfóxido (DMSO) verificou-se também a presença

de sinais marcantes para os derivados alcalóidicos, evidenciando o esqueleto de uma γ -lactona. O espectro de infravermelho (IV) mostra bandas de absorção nas faixas de 1640-1900 cm^{-1} e 3000-3750 cm^{-1} , indicando a presença dos grupamentos C=O e O-H, respectivamente. O espectro de massa (EM) exhibe pico molecular M^{+1} (237), compatível com a estrutura cantin-2,6-diona, de fórmula molecular $\text{C}_{14}\text{H}_8\text{N}_2\text{O}_2$.

As espécies do gênero *Simaba* são utilizadas para fins medicinais por grande parte da população sendo que a maioria das atividades farmacológicas são conferidas aos quassinóides e pouco foi investigado a respeito das propriedades dos alcalóides tipo cantinonas. Grande número de alcalóides ocorre na raiz e casca da madeira das espécies de *Simaba*, e menor número é encontrado no cerne e madeira. Sabe-se que as cantin-2,6-dionas produzem fotossensibilidade, contudo com baixa atividade quando comparada a outras substâncias potencialmente fototóxicas (OHMOTO & KAZUO, 1989). Do extrato etanólico da madeira de *S. polyphylla* foi isolada cantin-2,6-diona (0,3 g). O padrão de fragmentação apresentado é similar a cantinonas isoladas de *S. multiflora* (ARISAWA *et al.*, 1983); *S. guianensis* (CABRAL, 1989) e *S. cedron* (CHAGAS, 1993). Essa é a primeira citação da ocorrência de cantin-2,6-diona em *S. polyphylla*.

AGRADECIMENTOS

Ao Dr. James D. McChesney, do Research Institute of Pharmaceutical Sciences, Universidade do Mississippi, pela obtenção dos espectros de



Cantin-2,6-diona (**1**) - Sólido amarelo amorfo; pf 313-315 ; IV (KBr) ν max. (cm^{-1}) 3080, 2980, 2860, 1640, 1610, 1580, 1490, 1460, 1420, 1355, 1325, 1240, 1185, 1150, 1120, 1025, 975, 835, 775, 750, 705, 655, 630 cm^{-1} ; EM: m/z (%) 237 ($M^+ + 1$) 237(100), 208(20), 180(11), 179(13), 164(16), 154(4), 153(6), 152(4), 28(4), 127(8), 126(4), 118(9), 101(6), 90(10), 77(4), 76(8), 75(7), 74(4), 62(6); RMN¹H (registro a 300MHz em DMSO-deuterado): 1 δ 7,4 (1H-s), 4 δ 7,7 (1H-d, J=12Hz), 5 δ 6,8 (1H-d, J=12Hz), 8 δ 8,4 (1H-d, J=9Hz), 9 δ 7,8 (1H-dd, J=9Hz), 10 δ 7,5 (1H-dd, J=9Hz), 11 δ 8,3 (1H-d, J=9Hz).

RMN¹H e EM; ao Prof. Dr. Ângelo C. Pinto, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, pela obtenção dos espectros de RMN¹H, RMN¹³C e APT; ao CNPq pelo auxílio recebido através da bolsa de pós-graduação; ao Convênio INPA/FUA, pela oportunidade de desenvolver este trabalho.

Bibliografia citada

- ARISAWA, M.; KINGHORN, A. D.; CORDELL, G. A.; FARNSWORTH, N. R. 1983. Plant anticancer agents. XXIV. Alkaloid constituents of *Simaba multiflora*. *J. Nat. Prod.*, 46(2):222- 225.
- CABRAL, J. A. S. 1989. *Biological and chemical evaluation of Cajurana [Simaba guianensis Aubl. (Simaroubaceae)]*. Tese de Doutorado - Universidade do Mississippi, EUA, 128p.
- CABRAL, J. A. S.; McCHESNEY, J. D.; MILHOUS, W. K. 1993. A new antimalarial quassinoid from *Simaba guianensis*. *J. Nat. Prod.*, 56(11):1954-1961.
- CAVALCANTE, P. B. 1983. Revisão Taxonômica do Gênero *Simaba* Aubl. (Simaroubaceae) na América do Sul, *Publicações Avulsas do Museu Paraense Emilio Goeldi*, n.37. Belém, 85p.
- CHAGAS, S. O. 1993. *Contribuição ao estudo de Simaba cedron Cronquist (Simaroubaceae)*. Dissertação de mestrado não publicada, INPA/FUA, Manaus.
- CRONQUIST, A. 1968. *The evolution and classification of the plants*. Boston, Houghton Mifflin Co. X, vol.2, 396p.
- ENGLER, A.; PRANTL, K. 1931. Simaroubaceae. *Die Natürlichen Pflanzenfamilien*, ed.2, 2(19):359-405.
- HALL, J. H.; LEE, K. H.; IMAKURA, Y.; OKANO, M.; JOHNSON, A. 1983. Antiinflammatory agents. III. Structure-activity relationships of brusatol and related quassinoids. *J. Pharm. Sci.*, 72(11):1282-1284.
- OHMOTO, T.; KAZUO, K. 1989. *Canthin-6-one alkaloids*. Arnold Broschi ed.; Acad. Press/ New York, 36:135-170.
- PIERRE, A.; GERO, M.R.; TEMPETE, C.; POLONSKY, J. 1980. Structural requirements of quassinoids for the inhibition of cell transformation. *Biochem. Biophys. Res. Commun.*, 93: 675-686.
- SUFFNESS, M.; DOUROS, J. 1979. III. Drugs of plant origin. *Methods in Cancer Research*, 16:73-126.

Aceito para publicação em 03.09.97