

CONSTITUINTES QUÍMICOS DOS GALHOS E CASCAS DOS GALHO DE
Angostura bracteata (NEES & MART.) KALLUNKI (RUTACEAE)

Pablo Pinheiro Azevedo (IC)^{1,2}, Vanderlúcia Fonseca de Paula (PG)³

RESUMO

Este estudo fitoquímico investigou a constituição química dos galhos e cascas dos galhos de *Angostura bracteata*, uma planta da família Rutaceae, com foco no isolamento e caracterização de substâncias bioativas. O material vegetal foi coletado em Jequié-BA e os extratos foram obtidos por maceração em hexano, acetato de etila e metanol. Para purificação dos compostos, foram realizadas sucessivas colunas cromatográficas dos extratos, monitoradas por cromatografia em camada delgada (CCD), seguidas de análise por cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (CG-EM) e Ressonância Magnética Nuclear de hidrogênio e Carbono 13 (RMN de ¹H e ¹³C). Os resultados dessa análise mostrou a presença de vários alcaloides quinolínicos no extrato hexânico da casca, sendo esses identificados como: 2-propilquinolina, 2-pentilquinolina, 2-(*trans*-1,2-epoxipentil)quinolina e 2-[2-(3,4-metilenodioxifenil)etil]quinolina. No extrato acetato de etila dos galhos também foi constatada a presença de alcaloides alcaloides quinolínicos, com destaque para um composto ainda não isolado de *A. bracteata*, identificado como 2-[3',4'-(metilenodioxifenil)etil]-quinolina. A pesquisa também apontou a existência de outros compostos impuros, surgindo a necessidade de utilização de outros métodos para purificação antes da elucidação estrutural. Além disso, o estudo destaca o potencial terapêutico de *A. bracteata*, especialmente no tratamento de doenças tropicais negligenciadas como a leishmaniose, uma vez que diversos alcaloides quinolínicos apresentam tal atividade. A continuação da pesquisa, incluindo análise por RMN, será fundamental para confirmar e explorar o potencial de novos compostos bioativos com atividade antileishmania.

Palavras-chave: alcaloides, *Angostura bracteata*, leishmaniose, Rutaceae.

CHEMICAL CONSTITUENTS OF THE BRANCHES AND BRANCH BARK OF
Angostura bracteata (NEES & MART.) KALLUNKI (RUTACEAE)

ABSTRACT

This phytochemical study investigated the chemical composition of the branches and branch bark of *Angostura bracteata*, a plant of the Rutaceae family, focusing on the isolation and characterization of bioactive substances. The plant material was collected in Jequié, Bahia (Brazil), and extracts were obtained by maceration in hexane, ethyl acetate, and methanol. For compound purification, successive chromatographic column separations were performed on the extracts, monitored by thin-layer chromatography (TLC), followed by analysis using gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) and

proton and carbon-13 nuclear magnetic resonance (^1H and ^{13}C NMR). The results of this analysis revealed the presence of several quinoline alkaloids in the hexane extract of the bark, identified as: 2-propylquinoline, 2-pentylquinoline, 2-(*trans*-1,2-epoxypentyl)quinoline, and 2-[2-(3,4-methylenedioxyphenyl)ethyl]quinoline. In the ethyl acetate extract of the branches, quinoline alkaloids were also detected, with emphasis on a compound not previously isolated from *A. bracteata*, identified as 2-[2(3',4'-(methylenedioxyphenyl)ethyl)quinoline. The study also revealed the presence of other impure compounds, indicating the need for additional purification methods prior to structural elucidation. Furthermore, the study highlights the therapeutic potential of *A. bracteata*, especially in the treatment of neglected tropical diseases such as leishmaniasis, as several quinoline alkaloids exhibit such activity. Ongoing research, including further NMR analysis, will be essential to confirm and explore the potential of new bioactive compounds with antileishmanial activity.

Keywords: alkaloids, *Angostura bracteata*, leishmaniasis, Rutaceae.

INTRODUÇÃO

Desde os primórdios da humanidade, os seres humanos têm desenvolvido saberes e práticas a partir da interação com o ambiente em que vivem. Dentre esses conhecimentos, destaca-se o uso de plantas medicinais, cuja importância é notável na promoção da saúde e na preservação da vida. Com propriedades terapêuticas transmitidas oralmente ao longo das gerações, essas plantas se tornaram recursos fundamentais, sobretudo em comunidades com menor acesso à medicina convencional (BADKE et al., 2012). A fitoterapia era especialmente comum em áreas rurais e entre populações menos favorecidas, devido ao fácil acesso e ao baixo custo. Contudo, nas últimas décadas, observa-se uma crescente valorização do uso desses medicamentos também em centros urbanos, sendo prática difundida em diversas regiões do mundo, como África, América Latina e Ásia (MACIEL et al., 2002).

O Brasil, detentor de uma das maiores biodiversidades do planeta, destaca-se no cenário de pesquisas em Química de Produtos Naturais. Plantas nativas dos biomas brasileiros, como a Floresta Amazônica, a Mata Atlântica e o Cerrado, são amplamente utilizadas pela população local no tratamento de doenças tropicais, como leishmaniose, malária e esquistossomose. A tradição popular tem sido essencial na identificação das propriedades curativas dessas espécies, o que tem despertado o interesse de

pesquisadores nas áreas de botânica, farmacologia e fitoquímica (MACIEL *et al.*, 2002). O estudo de compostos bioativos presentes nessas plantas, como flavonoides, alcaloides, terpenos e quinonas, revela grande potencial terapêutico. Assim, a investigação científica sobre plantas medicinais surge como alternativa promissora e menos tóxica frente aos tratamentos convencionais, especialmente no combate à leishmaniose (RODRIGUES *et al.*, 2014).

MATERIAIS E MÉTODOS

O material vegetal de *Angostura bracteata* foi coletado na Fazenda Brejo Novo, município de Jequié-BA. Uma exsicata (HUESB 14729) foi depositada no Herbário da Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia – HUESB.

Os galhos (409,7 g) e suas cascas (115,5 g) foram separados, secos em estufa com circulação de ar a 40 °C. Em seguida, foram macerados e submetidos à extração a frio com solventes de diferentes polaridades: hexano (H) acetato de etila (AE) e metanol (M). Os extratos foram concentrados em evaporador rotatório, sob pressão reduzida, originando os extratos brutos AEGAB (7,18 g) e MGAB (10,00 g), dos galhos, e HCAB (1,585 g), AECAB (4,21 g) e MGAB (16,28 g), das cascas dos galhos.

Para o estudo fitoquímico, os extratos foram inicialmente analisados por cromatografia em camada delgada (CCD), visando determinar o sistema de solventes adequado para a cromatografia em coluna (CC).

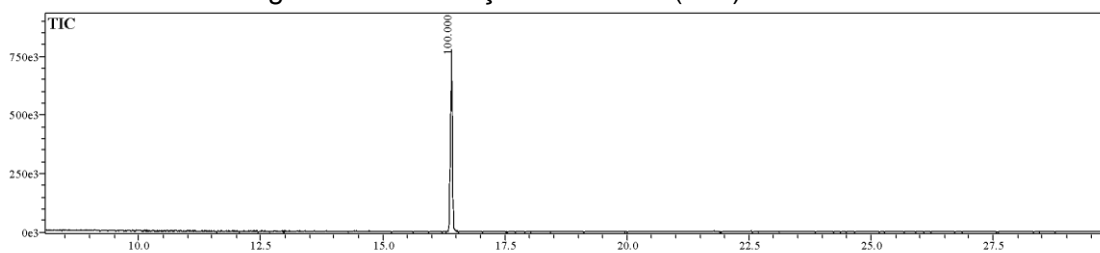
O extrato AEGAB foi fracionado utilizando hexano/acetato de etila (8:2, v/v), gerando oito frações (AEGAB 1–8). Essas frações passaram por novos fracionamentos para isolamento dos constituintes químicos. Esse procedimento resultou no isolamento de uma substância do extrato AEGAB a qual foi analisada por Ressonância Magnética Nuclear (RMN) de ¹H e ¹³C, além de Cromatografia Gasosa acoplada à Espectrometria de Massas (CG-EM).

O extrato HCAB foi submetido a fracionamento por cromatografia em coluna, usando sílica gel como fase estacionária e, uma mistura de hexano/acetato de etila (9:1, v/v), como fase móvel. Desse fracionamento foram obtidos 13 grupos de frações (HCAB 1–13). As frações mais puras, e menos polares, foram analisadas por CG-EM) para identificação de alguns de seus constituintes químicos.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

A análise por CG-EM da subfração AEGAB-5.(1+2) revelou a presença de um único pico no cromatograma (Figura 1), indicando um composto puro, denominado PPA-1. Esse composto, um óleo amarelado, apresentou fluorescência sob luz UV 254 nm e coloração alaranjada com o reagente de Dragendorff, evidenciando tratar-se de um alcaloide. O espectro de massas mostrou o pico do íon molecular em $m/z = 277$. Os dados de massas, associado aos dados de RMN de ^1H e ^{13}C , possibilitou a proposição da fórmula molecular $\text{C}_{19}\text{H}_{17}\text{NO}_3$, para esse composto.

FIGURA 1. Cromatograma da subfração AEGAB-5.(1+2).



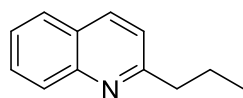
Fonte: Autor.

O espectro de RMN de ^1H apresentou grande semelhança com o do composto 4-metoxi-2-[3',4'-(metilendioxifenil)etil]quinolina, já isolado de *A. bracteata*, diferindo apenas pela ausência de uma metoxila. Assim, PPA-1 foi identificado como 2-[2-(3',4'-(metilendioxifenil)etil)quinolina (Figura 2), cuja estrutura foi confirmada pelo RMN de ^{13}C . Embora esse composto tenha sido previamente isolado da casca do caule de *Angostura longiflora* (Fournet *et al.*, 1989), este é o primeiro relato de sua ocorrência em *A. bracteata*.

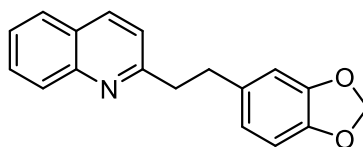
O cromatograma da subfração AEGAB-7.5 apresentou três picos principais, possivelmente alcaloides, devido às massas moleculares ímpares observadas em seus respectivos espectros de massas. Como não houve correspondência com a biblioteca de massas, os compostos serão separados por HPLC para posterior identificação por RMN.

A análise por CG-EM das frações obtidas do extrato HCAB revelaram a presença de vários alcaloides quinolínicos (Figura 2), sendo quatro deles identificados como: 2-propilquinolina (Fração 1, 2 e 3), 2-pentilquinolina (Frações 1 e 2), 2-(*trans*-1,2-epoxipentil)quinolina (Frações 3 a 9), 2-[2-(3,4-metilendioxifenil)-etil]quinolina (frações 6, 7 e 8).

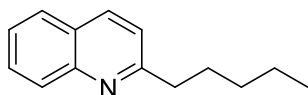
FIGURA 2. Estruturas dos alcaloides quinolínicos presentes nos galhos e nas cascas dos galhos de *Angostura bracteata*



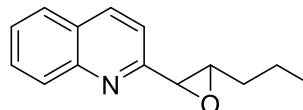
2-propilquinolina



2-[2-(3,4-metilenodioxifenil)-etil]quinolina



2-pentilquinolina



2-pentilquinolina

Fonte: Autor.

CONCLUSÕES/CONSIDERAÇÕES

Os resultados do estudo químico dos galhos e das cascas dos galhos de *A. bracteata*, obtidos até o momento, revelam que os constituintes majoritários dessa espécie são pertencentes à classe dos alcaloides quinolínicos. Essa é uma importante classe de produtos naturais, pois apresentam diversas propriedades biológicas e farmacológicas, incluindo atividade antileishmania. Esses resultados sugerem um grande potencial para a descoberta de novos compostos bioativos, que precisam de um estudo mais aprofundado. Além disso, esse estudo, mesmo que ainda parcial, contribuiu para a ampliação do conhecimento sobre a constituição química dessa espécie da família Rutaceae, ainda pouco estudada.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. ARRAIS, Denise. Avaliação da atividade leishmanicida de constituintes químicos dos galhos de *Angostura bracteata* (Nees & Mart.) Kallunki (Rutaceae). 2019. Dissertação (Mestrado) – Programa de Pós-Graduação em Química - PGQ, Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia, Campus Jequié, 2025.
2. FOURNET, A.; VAGNEUR, B.; RICHOMME, P.; BRUNETON, J. Aryl-2 et alkyl-2 quinoléines nouvelles isolées d'une Rutacée bolivienne: *Galipea longiflora*. Can. J. Chem., Canadá, v. 67, p. 2116-2118, 1989.
3. IRANI, J.R.; Groppo, M. Rutaceae in **Flora e Funga do Brasil**. Jardim Botânico do Rio de Janeiro. Disponível em: <<https://floradobrasil.jbrj.gov.br/FB281>>. Acesso em: 12 fev. 2025.
4. KALLUNKI, J. A; PIRANI, J. R; Synopses of *Angostura* Roem. & Schult. and *Conchocarpus* J. C. Mikan (Rutaceae). Kew Bulletin, v. 53., n. 2, p. 257-334, 1998.

5. MACIEL, Maria Aparecida M.; PINTO, Angelo C.; VEIGA JR., Valdir F.; GRYNBERG, Noema F.; ECHEVARRIA, Aurea. Plantas medicinais: a necessidade de estudos multidisciplinares. **Química Nova**, São Paulo, v. 25, n. 3, p. 429-438, 2002. Recebido em: 6 nov. 2000; aceito em: 25 jul. 2001.
6. PIRANI, J.R.; Groppo, M. *Rutaceae in Flora e Funga do Brasil*. Jardim Botânico do Rio de Janeiro. Available at: <<https://floradobrasil.jbrj.gov.br/FB281>>. Accessed on: 12 Mar. 2025.
7. RODRIGUES, K. A. de F. et al. **Brazilian flora extracts as source of novel antileishmanial and antifungal compounds**. *Memórias do Instituto Oswaldo Cruz*, Rio de Janeiro, v. 109, n. 6, p. 873-879, 2014.