

48  
2EJ

**UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTONOMA DE MEXICO**

**FACULTAD DE QUIMICA**



**ESTUDIO QUIMIOTAXONOMICO DE LA SALVIA KARWINSKII**



**T E S I S**  
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE.

EXAMENES PROFESIONALES  
FAC. DE QUIMICA

**Q U I M I C A**  
P R E S E N T A:  
**LUCINA SANCHEZ ESPINOSA**

**MEXICO, D. F.**

**1995**

**FALLA DE ORIGEN**

**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

## JURADO ASIGNADO

Presidente	Prof. ALFONSO ROMO DE VIVAR
Vocal	Prof. ROCIO POZAS HORCASITAS
Secretario	Prof. BALDOMERO ESQUIVEL RODRIGUEZ
1er. Suplente	Prof. PATRICIA ELIZALDE GALVAN
2do. Suplente	Prof. RICARDO JORGE CARDENAS PEREZ

LUGAR DONDE SE DESARROLLO EL TEMA  
**INSTITUTO DE QUIMICA, UNAM**

ASESOR DEL TEMA



**M.en C. BALDOMERO ESQUIVEL RODRIGUEZ**

SUSTENTANTE



**LUCINA SANCHEZ ESPINOSA**

**ESTA TESIS SE LLEVO A CABO EN EL INSTITUTO DE QUIMICA  
DE LA UNAM BAJO LA ASESORIA DEL  
M.en C. BALDOMERO ESQUIVEL RODRIGUEZ,  
CON EL APOYO PARCIAL DEL PROYECTO PAPIIT  
IN 212594 DGAPA-UNAM**

## INDICE

-INTRODUCCION.....	1
-ANTECEDENTES.....	4
-PARTE TEORICA.....	13
-CONCLUSION.....	20
-PARTE EXPERIMENTAL.....	22
-ESPECTROS.....	25
-BIBLIOGRAFIA.....	32

## INTRODUCCION

## INTRODUCCION

Como otras ramas del saber, los conocimientos sobre la vegetación se inician indudablemente con el comienzo de la humanidad misma.

El hombre cazador y recolector, que vivió en México hace 20 000 años o más estaba relacionado con la naturaleza en forma estrecha y el éxito de sus actividades dependía, en gran parte, de sus habilidades para distinguir y reconocer diferentes tipos ecológicos que propiciaban albergue a las especies útiles, objeto de su búsqueda y persecución.<sup>1</sup>

Los conocimientos acerca de nuestras plantas medicinales si bien muchos de ellos solamente empíricos, son muy antiguos, pues datan de épocas muy anteriores al descubrimiento de América. Los indígenas en virtud de su contacto más íntimo con la naturaleza y por una experiencia prolongada y tal vez dolorosa en más de una ocasión, habían adquirido amplios conocimientos sobre las virtudes curativas de las plantas y las sabían aprovechar con sorprendente acierto.<sup>2</sup>

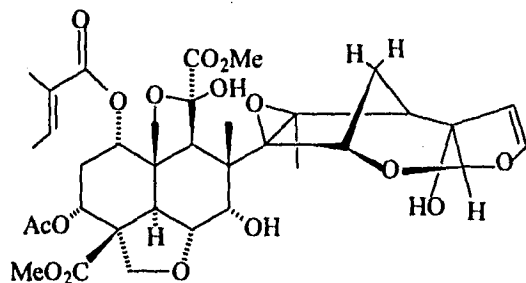
La flora mexicana es una de las más ricas del mundo, debido a que el país cuenta con todos los climas desde el tropical de las costas hasta el frío de las montañas, la precipitación pluvial varía también en forma notable, existiendo zonas muy húmedas así como otras de extrema aridez.<sup>3</sup>

El hombre obtiene de las plantas directa o indirectamente alimento, vestido, medicamentos, colorantes, estimulantes y muchos otros productos que resaltan la importancia de conservar, conocer y usar adecuadamente los recursos naturales.

Los vegetales son verdaderos laboratorios vivos en donde se elaboran millones de diferentes compuestos, que en diversas formas han sido factores decisivos en los fenómenos sociales y económicos determinantes en la evolución del hombre.

Los productos naturales obtenidos de los vegetales proporcionan estructuras particularmente útiles en las áreas de farmacología, agricultura y quimiotaxonomía.

Algunos compuestos encontrados en los vegetales son utilizados como antialimentarios\* naturales contra insectos ya que son poco tóxicos para el hombre, animales, insectos de utilidad y otros organismos, e inhiben el alimento de muchos insectos nocivos y son tóxicos para los mismos, por ejemplo la azadiractina<sup>4</sup>. Estas sustancias han causado gran expectativa en la agricultura y en la industria alimentaria con el beneficio adicional de que los derivados de los vegetales son biodegradables.<sup>5</sup>



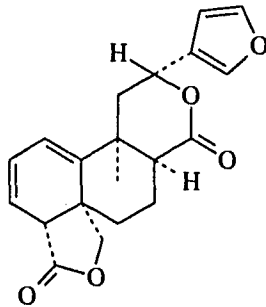
**Azadiractina**

\* Antialimentario.- Es definido por *Katsura Munakata*<sup>17</sup> como un compuesto químico que inhibe la alimentación del insecto pero no lo mata directamente, el insecto frecuentemente permanece cerca de la planta y posiblemente muera de hambre.



Los diferentes tipos de estructuras de los compuestos antialimentarios, presentan una variedad de grupos funcionales en su estructura y muchos aparecen altamente oxidados, un ejemplo de éstos es la molécula de la azadiractina. El alto contenido de oxígenos en las moléculas hace mayor la actividad de los compuestos antialimentarios, ya que los hace solubles en agua, y esto hace más rápida y efectiva la interacción con el insecto.<sup>4</sup>

No todos los antialimentarios son altamente polares, tal es el caso de la 1,10-deshidrosalviarina, por lo tanto es probable que tenga un modo diferente de acción.



1,10-deshidrosalviarina

Los ejemplos de compuestos antialimentarios ya mencionados son compuestos con actividad antialimentaria potente contra el Adulto *Diabrotica virgifera virgifera* Le Conte gusano de la raíz del maíz, su efectividad es la siguiente: DE<sub>50</sub> de azadiractina es de 0.39 nmol/disco<sup>18</sup>. DE<sub>50</sub> de 1,10-deshidrosalviarina es de 1.1 nmol/disco en 24 horas.<sup>18</sup>

Estudios de la actividad antialimentaria de estos compuestos podrían descubrir la presencia de nuevas sustancias y se podría llegar a correlacionar entre estructura y actividad antialimentaria.

ANTECEDENTES

## ANTECEDENTES

La familia de plantas *Labiatae* es muy abundante en el mundo, dentro de dicha familia se han clasificado más de 3500 especies que se encuentran ampliamente distribuidas en la naturaleza y que son habituales en regiones de climas cálido y templado y muy raros en climas fríos.

La importancia del estudio de la familia *Labiatae* es debido a que algunas especies se han utilizado desde hace mucho tiempo como plantas medicinales y otras son importantes por su alto contenido en aceites esenciales.

El estudio fitoquímico de *Labiadas* ha permitido aislar diterpenoides biológicamente activos.<sup>6</sup>

La familia de *Labiadas* se divide aproximadamente en 220 géneros, y un número superior al cincuenta por ciento de las especies pertenecen a sólo ocho géneros *Salvia* (900), *Hyptis*(350), *Scutellaria*(200), *Coleus*(200), *Plectranthus*(200), *Stachys*(200), *Nepeta*(150) y *Teucrium*(100).<sup>7</sup>

La familia de las *Labiadas* es abundante en el territorio nacional, constituye un grupo de plantas económicamente importantes para la vida cotidiana de sus pobladores y su uso se remonta a tiempos inmemoriales.

Todas las especies de esta familia contienen aceites esenciales particularmente en sus tejidos foliares, que les comunican propiedades aromáticas y tónico-estimulantes y, por lo tanto, reflejan su importancia económica en la industria farmacéutica. Son empleadas en la perfumería, en la industria alimenticia o como fuente de materia prima, por ejemplo la *Salvia officinalis* cuyo aceite esencial se usa en algunos alimentos como saborizante.<sup>8a, 8b</sup>

Por lo tanto el uso popular de las plantas de esta familia implica su posible utilidad farmacológica, en consecuencia, las especies de Labiadas mexicanas ofrecen grandes posibilidades en la investigación de los productos naturales como fuentes de sustancias biológicamente activas.

El género *Salvia* fue establecido hacia el año 1753 por Carlos Linneo<sup>16</sup> y es el más abundante y el más diversificado de las *Labiadas*, con más de novecientas especies descritas, subdividido en cuatro subgéneros (*Salvia*, *Sclarea*, *Leonia* y *Calosphace*).

Las *Salvias* europeas y asiáticas pertenecen principalmente a los subgéneros *Salvia* y *Sclarea*. El subgénero *Leonia* se encuentra principalmente en América del Norte. El subgénero *Calosphace*, dividido en 105 secciones es el más común en México, Centro y Sudamérica.

El subgénero *Calosphace* es el más abundante con aproximadamente quinientas cincuenta especies y es en su totalidad americano.<sup>6</sup>

México cuenta con una gran diversidad y abundancia de vegetación especialmente del género *Salvia*.

Las principales propiedades que presentan los productos naturales de la familia Labiatae son: antivirales, antibacterianas, coleréticas, espasmolíticas o carminativas.<sup>9</sup> El género *Salvia* tiene una amplia aplicación en la industria cosmética y alimenticia, debido a su alto contenido en aceites esenciales.

Existen *Salvias* que poseen actividad insecticida y hay otras que se les atribuyen propiedades psicotrópicas, por ejemplo la *Salvia divinorum*.<sup>10</sup>

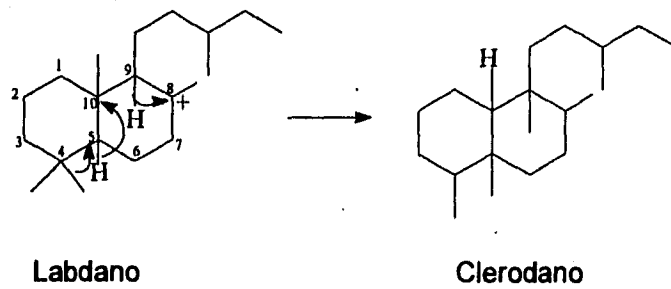
Las plantas elaboran sustancias que ejercen efectos fisiológicos, conocidos como constituyentes activos. La biosíntesis de estas sustancias en general se efectúa por vías metabólicas que conducen a la formación de metabolitos secundarios.

Los terpenos son metabolitos secundarios de las plantas, que presentan un esqueleto de carbono compuesto de unidades isoprenicas. La Acetil-Coenzima A es el precursor de todos los terpenos.

En la química de los terpenos un grupo importante es el que se refiere a los diterpenos, los cuales están formados por cuatro unidades de isopreno, es decir, compuestos por 20 átomos de carbono, la posterior ciclización de este tetrámero conduce a un precursor intermedio del que se derivan los clerodanos por medio de ciclizaciones y migraciones de metilos.

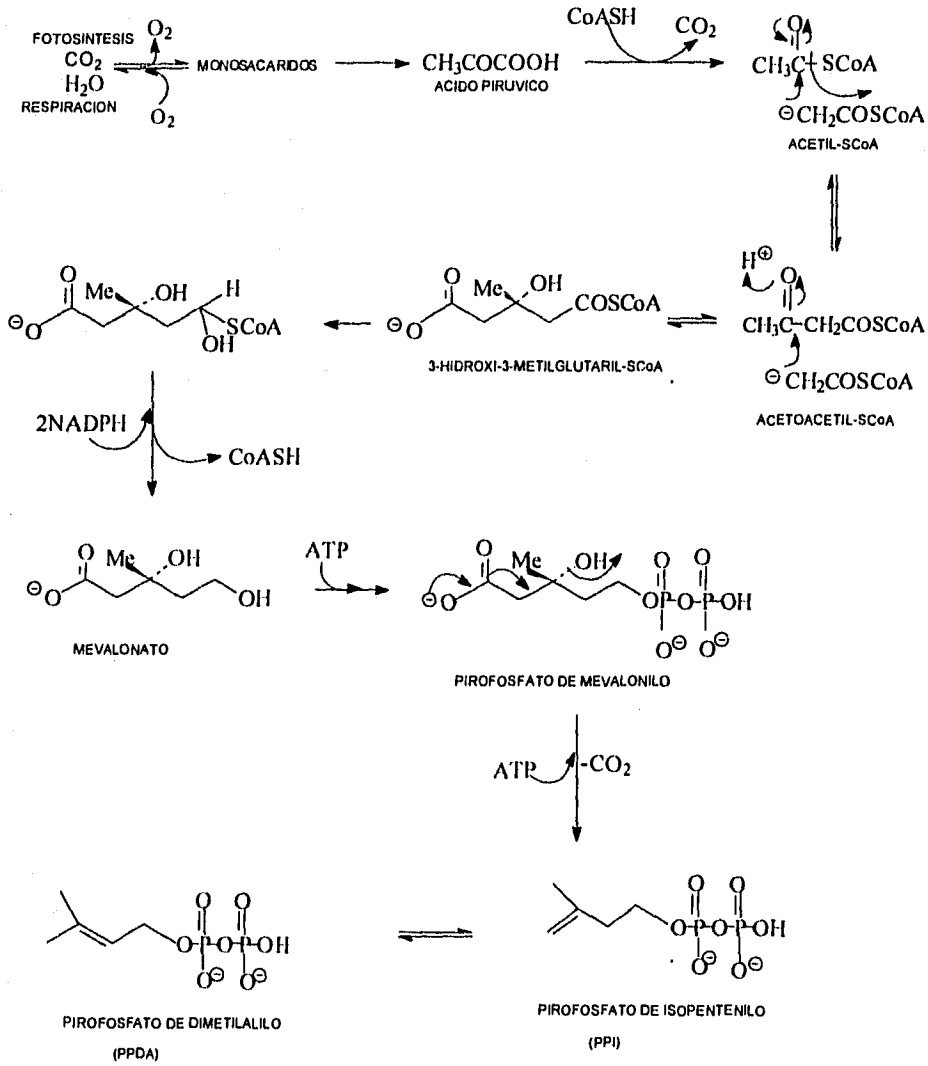
Los diterpenos tienen la interesante característica de poseer un gran intervalo de actividad biológica que varía desde sustancias inhibitorias de tumores, antileucémicos y antibióticos, hasta antialimentarios, hormonas e inhibidores del desarrollo vegetal.<sup>3</sup>

Los clerodanos biosintetizados a partir de la ruta del ácido mevalónico, presentan cuatro unidades de isopreno, y tienen como precursor directo al pirofosfato de geranyl-geranyl. La ciclización de éste y la pérdida de un protón conducen al pirofosfato de labdadienilo, en el cual las migraciones de los grupos metilo de C-4 a C-5 y de C-10 a C-9 dan como resultado el esqueleto de clerodano.

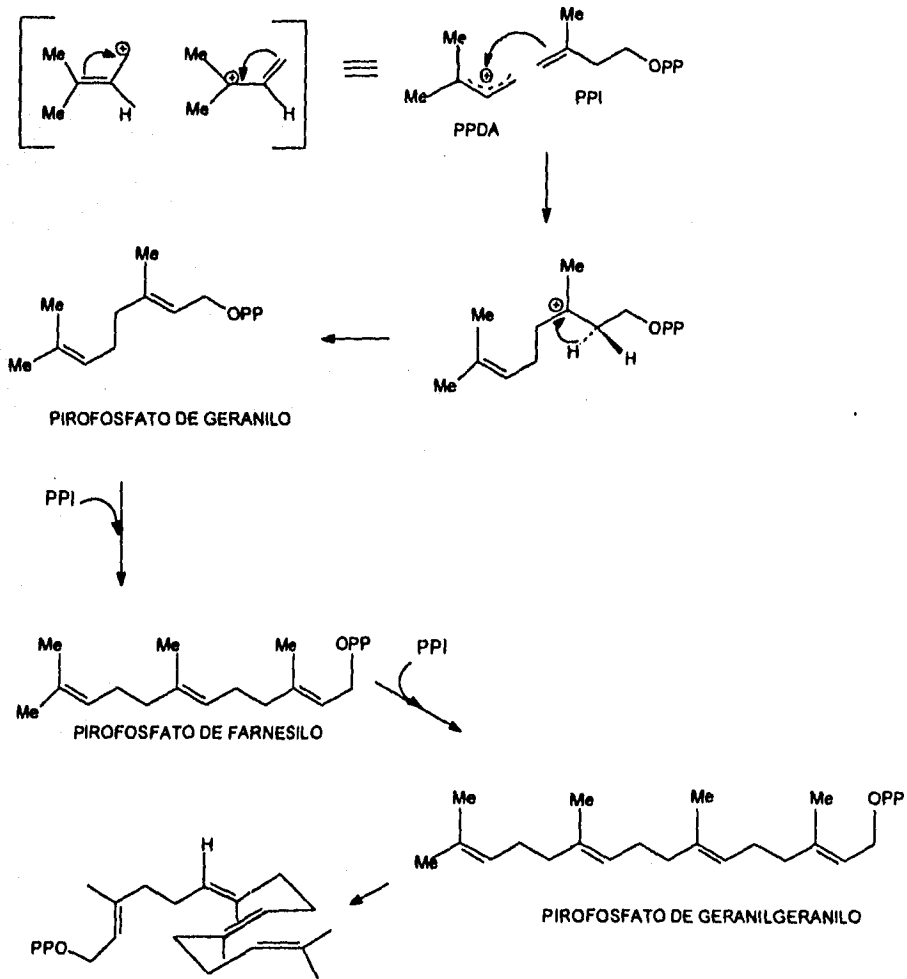


Es importante establecer que las diferentes ciclizaciones que puede sufrir el pirofosfato de geranil-geranilo y reordenamientos posteriores, acompañados por cambios en niveles de oxidación dan lugar a un gran y variado grupo, que comprende a cientos de estructuras de compuestos diterpénicos. (Esquema No. 1)

ESQUEMA No. 1  
BIOSINTESIS DE CLERODANOS

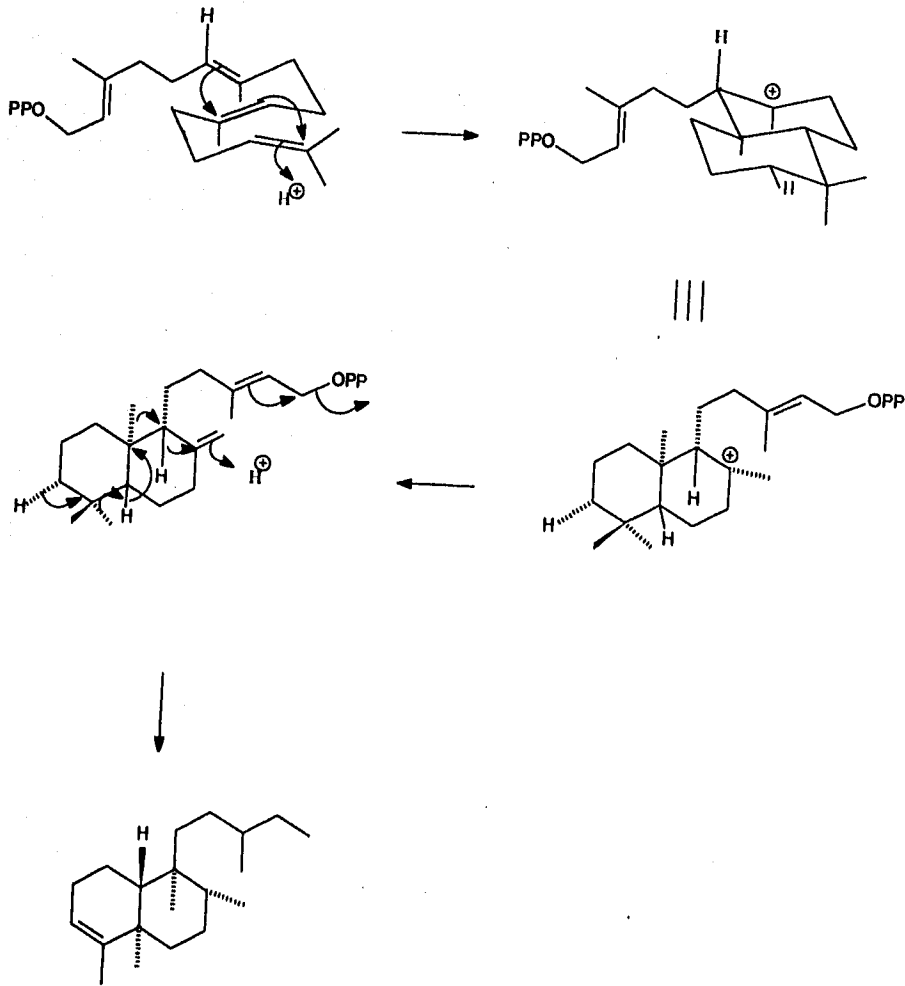


BIOSINTESIS DE CLERODANOS (continúa)





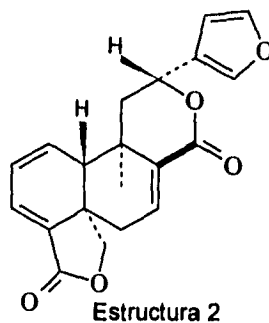
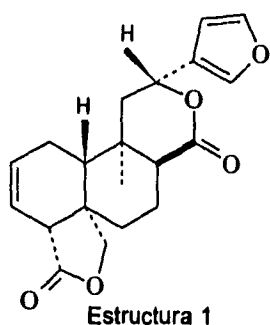
ESQUEMA No.1 (continuación)



NEO CLERODANO

Uno de los principales temas del conocimiento de los productos naturales es la composición química que hace posible establecer relaciones quimiotaxonómicas para una mejor clasificación sistemática de las plantas.

Tomando en cuenta la importancia taxonómica del estudio de las salvias mexicanas, y consultando los estudios realizados anteriormente sobre las especies *Salvia splendens*<sup>11</sup> y *Salvia gensneraefolia*<sup>12</sup> de las secciones Fulgentes y Nobiles respectivamente, de donde se obtuvieron la Gensnerofolina A (estructura 1), la Gensnerofolina B (estructura 2) y la Salviarina (estructura 1), siendo Gensnerofolina A y la Salviarina compuestos diterpénicos idénticos, se demuestra que las secciones Fulgentes y Nobiles podrían no ser diferentes una de la otra. La *Salvia karwinskii* (hierba de dos metros de altura con flores rojas, que crece en suelo amarillo arcilloso) pertenece a la sección Nobiles. Por lo tanto conociendo los estudios anteriores se realizó el estudio de ésta especie



Por consiguiente el objetivo de este trabajo es contribuir al estudio quimiotaxonómico de las salvias mexicanas, y continuar con el estudio taxonómico de las secciones Fulgentes y Nobiles.

## PARTE TEORICA

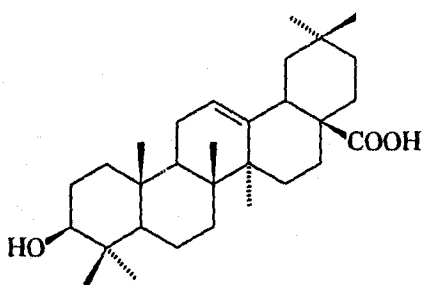
La *S. karwinskii* esta clasificada en la sección Nobiles del género *Salvia*.

La especie *S. karwinskii* analizada fue recolectada en Zoquillán, Estado de Puebla.

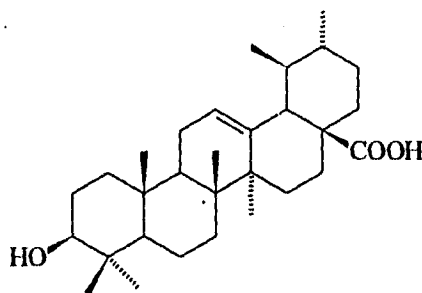
Del extracto acetónico de las partes aéreas se lograron aislar los siguientes compuestos:

De las fracciones eluidas con hexano/acetato de etilo (8:2) se aisló un sólido blanco amorfo con punto de fusión en un intervalo de 250°-263°C.

En el espectro de infrarrojo (espectro No. 1) muestra bandas características para una función de ácido carboxílico (3516 y 1694  $\text{cm}^{-1}$ ), el análisis de estas fracciones mediante cromatografía en capa fina, utilizando referencias disponibles de los ácidos triterpénicos aislados de otras especies de *Salvias*, demostraron que los constituyentes presentes correspondían a los ácidos oleanólico I y ursólico II, además de ser aislados estos ácidos triterpénicos en estudios anteriores de una especie de *S. karwinskii* (especie recolectada en San Cristobal de las Casas Chiapas),<sup>13</sup> por lo tanto hace evidente que la muestra considerada como un compuesto puro representa una mezcla de isómeros estructurales estrechamente relacionados.



I ácido oleanólico



II ácido ursólico

El segundo compuesto se obtuvo de una segunda columna, utilizando un grupo de fracciones eluidas con hexano/acetato de etilo (6:4) de la primer columna.

Se aisló un sólido blanco (2 mg) que tiene un punto de fusión de 198° -199°C.

El peso molecular de esta sustancia determinado por espectrometría de masas, corresponde a una fórmula molecular  $C_{20}H_{20}O_5$  ( $M^+340$ ). (espectro No.4).

El espectro de IR (espectro No.2) muestra bandas características en (1779 y 1722  $cm^{-1}$ ) asignables a grupos carbonilo de lactonas de 5 y 6 miembros respectivamente, y bandas en (3055, 1505 y 874  $cm^{-1}$ ) correspondientes al anillo de furano.

En el espectro de R.M.N.  $^1H$  (espectro No.3), tabla no.1, se observa en 7.49 ppm un multiplete; en 7.44 un triplete ( $J=2$ ), cada señal integra para un protón (H-16 y H-15) y, en 6.45 ppm un doble de dobles ( $J=2.1$ ) que integra para un protón (H-14). Estas señales son características para

un furano  $\beta$  sustituido. Por otra parte en 6.15, 6.0 y 5.6 ppm se observan las señales características para un dieno homoanular (H-2, H-1 y H-3 respectivamente).

En 5.5 ppm se observan además un doble de dobles, que es la parte X de un sistema ABX, asignado a H-12, con constantes de acoplamiento de 12.5 y 3 Hz, las cuales indican una orientación axial para este hidrógeno.

La parte AB se localiza en 1.97 ppm como una señal doble de dobles con constantes de acoplamiento de 15 y 12.5 Hz, y en 2.6 ppm un doble de dobles con constantes de acoplamiento de 15 y 3 Hz, correspondientes a los protones H-11 axial y ecuatorial respectivamente.

Así mismo se observa un sistema AB el cual lo forman los protones diastereotópicos del metileno 19. Una parte del sistema AB se observa en 4.49 ppm como un doblete con una constante de acoplamiento de 8.5 Hz correspondiente al protón H-19 pro-R y la otra parte se le asignó a un doble de dobles en 4.0 ppm cuyas constantes de acoplamiento son de 8.5 y 2 Hz, correspondientes al H-19 pro-S.

El protón 19 pro-S se muestra como un doble de dobles ocasionado por el acoplamiento a larga distancia de tipo W con el protón de la posición  $6\beta$ -axial, esto indica que no hay sustituyentes en la posición  $6\beta$  y que el metileno C-19 tiene orientación  $\alpha$ -axial.

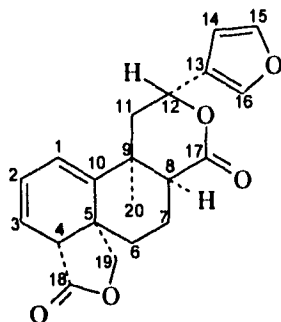
Este mismo metileno C-19 está unido a un átomo de oxígeno y a uno de carbono totalmente sustituido formando así una  $\gamma$ -lactona ( $1779\text{ cm}^{-1}$ ). Este sistema está de acuerdo con las señales que se presentan en el espectro de R.M.N.  $^{13}\text{C}$  (espectro No. 5) en 51.5(d), 42.3(s), 75.8 (t) y 177.2 (s)ppm.

El espectro de R.M.N. de  $^1\text{H}$  muestra además, un triplete en 3.10 ppm con una constante de acoplamiento de 3 Hz que integra para un protón asignado al H-4, así como en 2.55 ppm un triplete con una constante de acoplamiento de 3 Hz asignado al H-8.

En el espectro de R.M.N.  $^{13}\text{C}$  se observa el metilo 20 en 32.1 ppm y en el espectro de R.M.N.  $^1\text{H}$  un singulete en 1.25 ppm, el cual tiene una orientación  $\alpha$ -axial.

En el espectro de R.M.N.  $^{13}\text{C}$  ( $\text{CDCl}_3$ )  $\delta(\text{ppm})$  125 MHz (espectro No. 5) Tabla No. 2 además de las señales antes mencionadas, muestra otras pertenecientes a cuatro carbonos metilenos, dos carbonos metinos  $\text{sp}^3$  cuatro átomos de carbono olefínicos, cuatro carbonos furanoides, dos átomos de carbono cuaternarios y dos átomos de carbono de  $\gamma$  y  $\delta$  lactonas.

Los datos anteriores corresponden al compuesto 1,10-deshidrosalviarina.



1,10-deshidrosalviarina

La identidad de esta sustancia fue corroborada dado que se encontraron propiedades físicas, como el punto de fusión y el  $r_f$ , idénticas al de una muestra perfectamente pura y conocida de 1,10-

deshidrosalviarina aislada anteriormente de la *Salvia lineata*<sup>15</sup>.

Además de coincidir el punto de fusión y el  $n_D$  de éste compuesto con el de una muestra auténtica, la espectroscopia de IR, R.M.N. de  $^1\text{H}$  y E.M. fue acorde con lo descrito en la literatura.<sup>15</sup>

La asignación de los hidrógenos y los átomos de carbono de esta sustancia fueron corroborados por estudios de R.M.N. de alta frecuencia, los cuales no se efectuaron en la *Salvia lineata*.

Los desplazamientos químicos y constantes de acoplamiento mostrados en la Tabla No.1 fueron obtenidos a 500 MHz y confirmados por el espectro COSY (espectro No.6). La asignación previa de los átomos de  $^{13}\text{C}$  fué revisada y con base en los experimentos DEPT (espectro No.7) y de correlación heteronuclear C-H HETCOR. De acuerdo con estos espectros existe un error en la asignación original en los átomos C-2 y C-3 los cuales estaban intercambiados.



Tabla No.1  
DESPLAZAMIENTOS QUIMICOS EN R.M.N. <sup>1</sup>H

H	ppm (δ)	multiplicidad	J (Hz)
H-16	7.49	mult	
H-15	7.44	t	2.0
H-14	6.45	dd	2.1
H-1	6.00	d	7
H-2	6.15	ddd	10, 7, 3
H-3	5.6	dd	10, 3
H-12	5.5	dd	12.5 y 3
H-4	3.1	t	3
H-8	2.55	t	3
H-11ec	2.6	dd	3, 15
H-11ax	1.97	dd	12.5, 15
H-20	1.25	s	
H-6β	1.38	ddt	14, 3.5, 2
H-6α	1.81	dt	14, 3.0
H-7β	2.06	dc	14, 3.0
H-7α	2.52	tt	14, 3.0
H-19	4.49	d	8.5
H-19	4.0	dd	8.5, 2

Espectro obtenido a 500 MHz, utilizando CDCl<sub>3</sub> como disolvente y TMS como referencia interna.

**Tabla No. 2**  
**DESPLAZAMIENTOS QUIMICOS EN R.M.N. <sup>13</sup>C**

C	<sup>13</sup> C R.M.N. (δ)	multiplicidad
1	119.6	d
2	124.2	d
3	119.2	d
4	51.5	d
5	42.3	s
6	32.0	t
7	19.0	t
8	48.3	d
9	37.6	s
10	139.4	s
11	40.6	t
12	70.7	d
13	124.7	s
14	108.3	d
15	143.8	d
16	139.7	d
17	171.3	s
18	177.2	s
19	75.8	t
20	32.1	c

Desplazamientos obtenidos utilizando CDCl<sub>3</sub> como disolvente a 125 MHz y como referencia interna TMS.  
s-singlete d-doblete t-triplete c-cuarteto

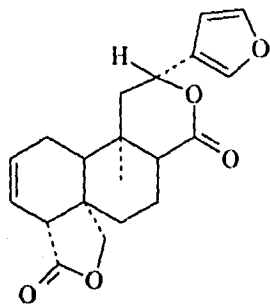
CONCLUSIONES

## CONCLUSIONES

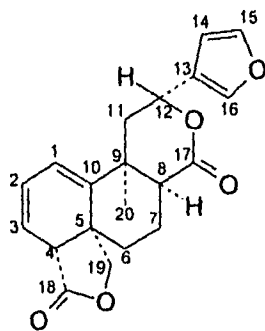
Del estudio fitoquímico de la *S. karwinskii*, de la sección Nobiles del género *Salvia*, se aisló la mezcla de los ácidos triterpénicos (ursólico y oleanólico), y un compuesto diterpénico (1,10-deshidrosalviarina), cuya purificación se realizó por métodos cromatográficos.

La 1,10-deshidrosalviarina fue aislada también de la *S. lineata* sección Fulgentes, sección que tiene una relación muy estrecha con la sección Nobiles en cuanto a compuestos diterpénicos parecidos.

Al diterpéno que se aisló de ambas se le asignó el nombre antes mencionado por estar estrechamente relacionado con la salviarina.



salviarina



1,10-deshidrosalviarina

La importancia que tiene el hacer este tipo de estudios es contribuir al conocimiento quimiotaxonómico de las *Salvias* mexicanas y encontrar metabolitos secundarios con posible actividad biológica como es el caso de la 1,10-deshidrosalviarina que es un antialimentario potente contra el Adulto *Diabrotica virgifera virgifera* Le Conte, gusano de la raíz del maíz, con una  $DE_{50}$  de 1.1 nmol/disco en 24 horas y contra *Spodoptera littoralis*.<sup>18</sup>

El estudio de la *S. karwinskii* contribuye precisamente al conocimiento quimiotaxonómico de las *Salvias* mexicanas, ya que se comprueba una vez más la relación que existe entre las secciones Fulgentes y Nobiles las cuales podrían no ser diferentes una de la otra.

PARTE EXPERIMENTAL

## PARTE EXPERIMENTAL

(*S. karwinskii*)

### APARATOS Y MATERIAL QUIMICO

Los puntos de fusión se determinaron en un aparato Fisher-Johns y no están corregidos.

Los espectros de infrarrojo se obtuvieron de un espectrofotómetro IR Perkin-Elmer 283 y un espectrofotómetro IR Nicolet FT- IR 5 sx.

Los espectros de patrones de fragmentación se obtuvieron de un espectrómetro de masas Hewlett-Packard 5945 a 70 eV mediante la técnica de impacto electrónico.

Los espectros de RMN de  $^1\text{H}$  se obtuvieron de un espectrómetro Varian-Gemini 200 ajustados a 200 MHz.

Los espectros de R.M.N. de  $^{13}\text{C}$  se obtuvieron de un espectrómetro Varian Unity de 125 MHz.

Los espectros de 300 MHz de  $^1\text{H}$  se obtuvieron de un espectrómetro Varian VXR -300s, y los de 500 MHz en un equipo Varian Unity. Los desplazamientos químicos están en ppm( $\delta$ ) tomando como referencia al TMS. Los valores de las constantes de acoplamiento (J) están en Hz.

Los soportes para las columnas de cromatografía fueron silica gel 60 de Merck (mallas 70/230, 230/400 y para placa ASTM).

Para seguir la pureza de los compuestos se utilizaron cromatoplasmas de gel de sílice de Merck, con indicador fluorescente, utilizando luz ultravioleta y sulfato cérico al 1% en  $\text{H}_2\text{SO}_4$  2N como reveladores.

## METODO DE SEPARACION Y AISLAMIENTO DE COMPUESTOS

La planta se recolectó en Zoquitlán, Puebla, y fue identificada por el Dr. T. P. Ramamoorthy y recolectada por el M. en C. Baldomero Esquivel Rodríguez.

El peso de las partes aéreas de la planta fue de 800 gramos, las cuales se sometieron a maceración en acetona (8 l) a temperatura ambiente por dos días. Posteriormente se eliminó el disolvente por destilación a presión reducida en un rotavapor, eliminando el disolvente por completo al alto vacío. Obteniéndose 34.3 gramos de extracto crudo seco más 8 gramos de sólidos.

El extracto crudo seco contenía tanto compuestos polares como no polares, por lo que se llevó a cabo una partición para facilitar la separación, utilizando como mezcla de disolventes 20% H<sub>2</sub>O/MeOH para los compuestos polares y 50% benceno/hexano para los no polares.

De la partición se obtuvieron las siguientes cantidades de extractos:

Parte no polar 15.7 gramos

Parte polar 11.3 gramos

Del extracto crudo seco polar se tomaron 8.3 gramos y se llevó a cabo una separación de los compuestos presentes por medio de una cromatografía en columna empacada con sílica gel para placa utilizando como eluyente mezclas de hexano/acetato de etilo de polaridad creciente.



De las fracciones eluidas con hexano/acetato de etilo (8:2), se aislaron 16 mg de un sólido blanco amorfo, con un punto de fusión de 250° - 263°C.

El espectro de infrarrojo (espectro No.1) de éste sólido muestra bandas características para una función de ácido carboxílico (3516 y 1694  $\text{cm}^{-1}$ ).

Se efectuó una segunda columna cromatográfica de un grupo de fracciones eluidas con hexano/acetato de etilo (6:4) de la columna original. En la segunda columna se utilizó alúmina, y como eluyente hexano.

De aquí se aisló un sólido blanco (2mg) que tiene un punto de fusión de 198°- 199°C.

El compuesto aislado fue el 1,10-deshidrosalviarina.

IR ( $\text{CHCl}_3$ )  $\nu$ -max.  $\text{cm}^{-1}$  1779, 1722  $\text{cm}^{-1}$  ( $\gamma$  y  $\delta$  lactonas respectivamente), 3055,1515 y 874  $\text{cm}^{-1}$  (anillo furano)

R.M.N.  $^1\text{H}$  ( $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$ (ppm) 500 MHz (Tabla No. 1).

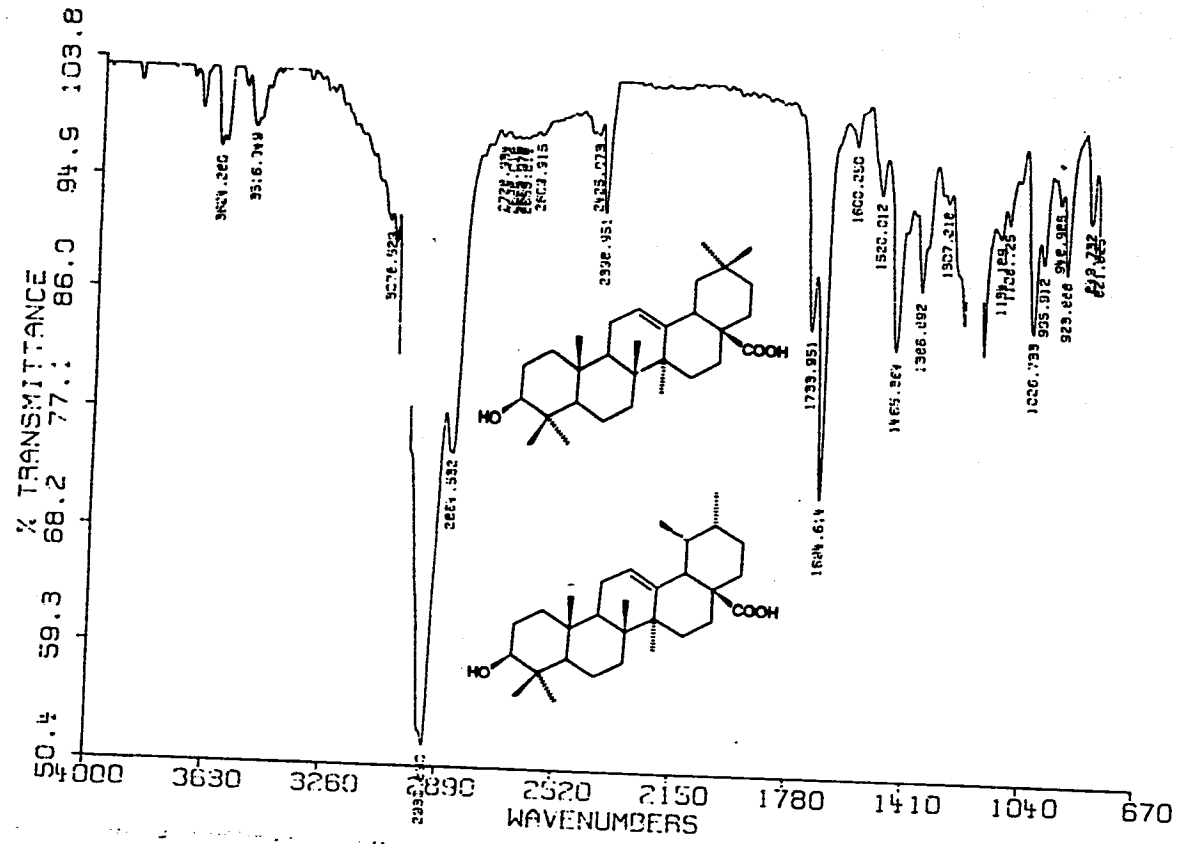
R.M.N.  $^{13}\text{C}$  ( $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  (ppm) 125 MHz (Tabla No. 2)

E.M. (m/z) ( $\text{C}_{20}\text{H}_{20}\text{O}_5$ ):  $\text{M}^+340$

**TESIS SIN PAGINACION**

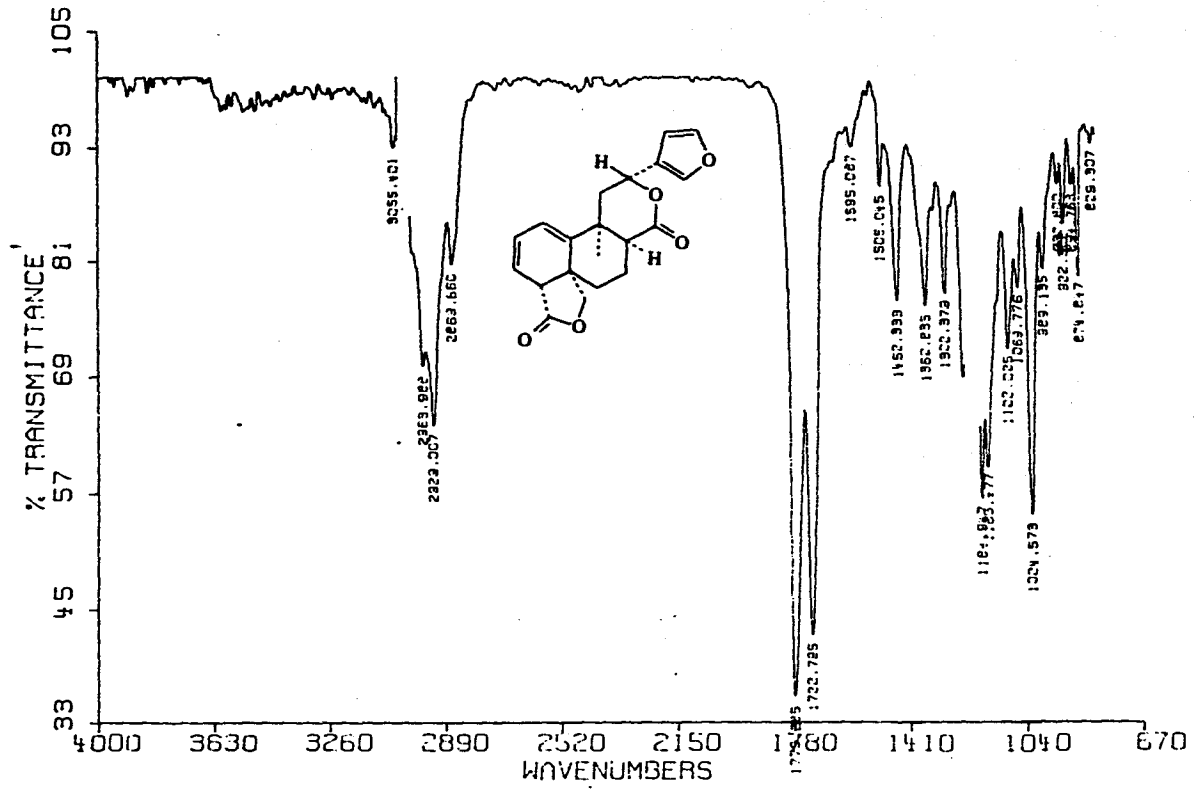
**COMPLETA LA INFORMACION**

ESPECTROS

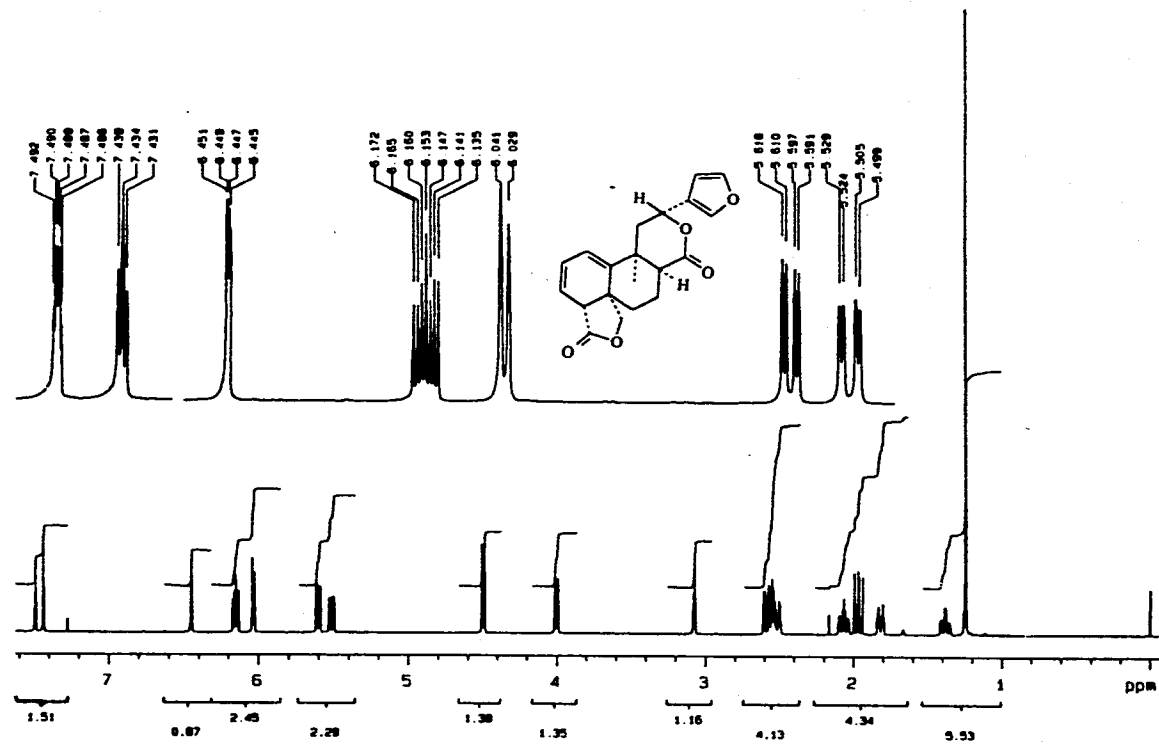


ESPECTRO No. 1

FALLA DE ORIGEN

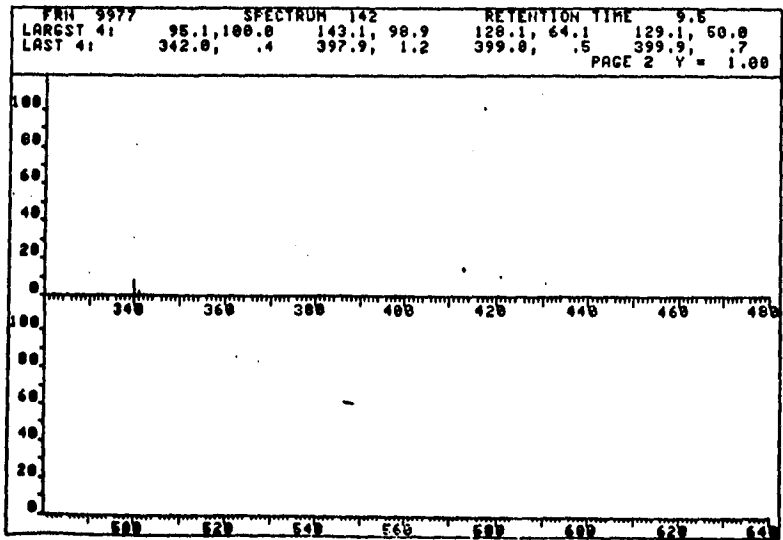
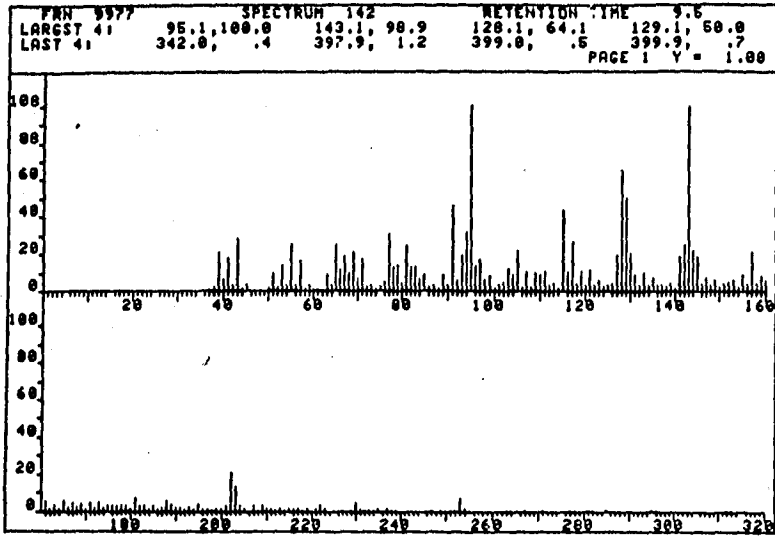


ESPECTRO No. 2

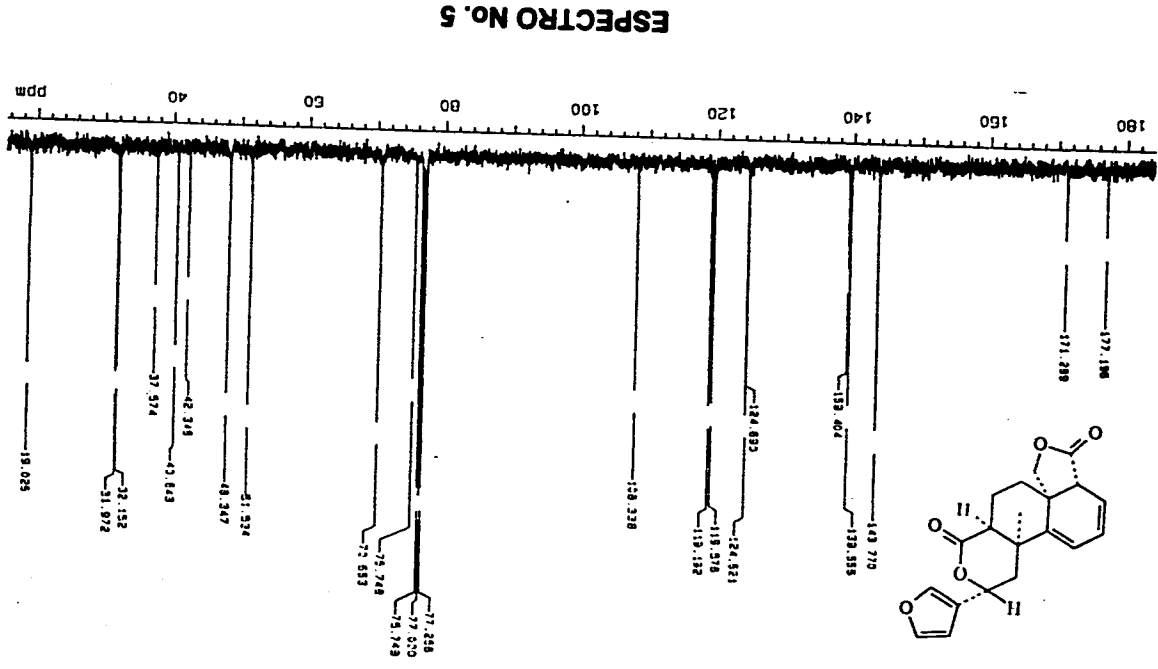


ESPECTRO No. 3

**ESPECTRO No.4**

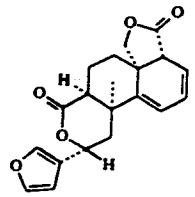
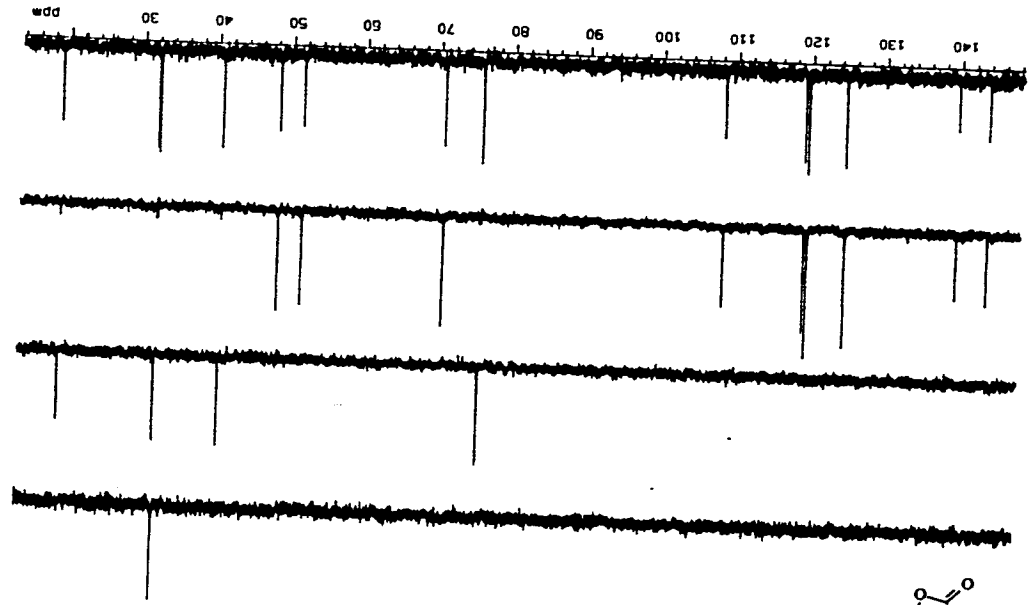


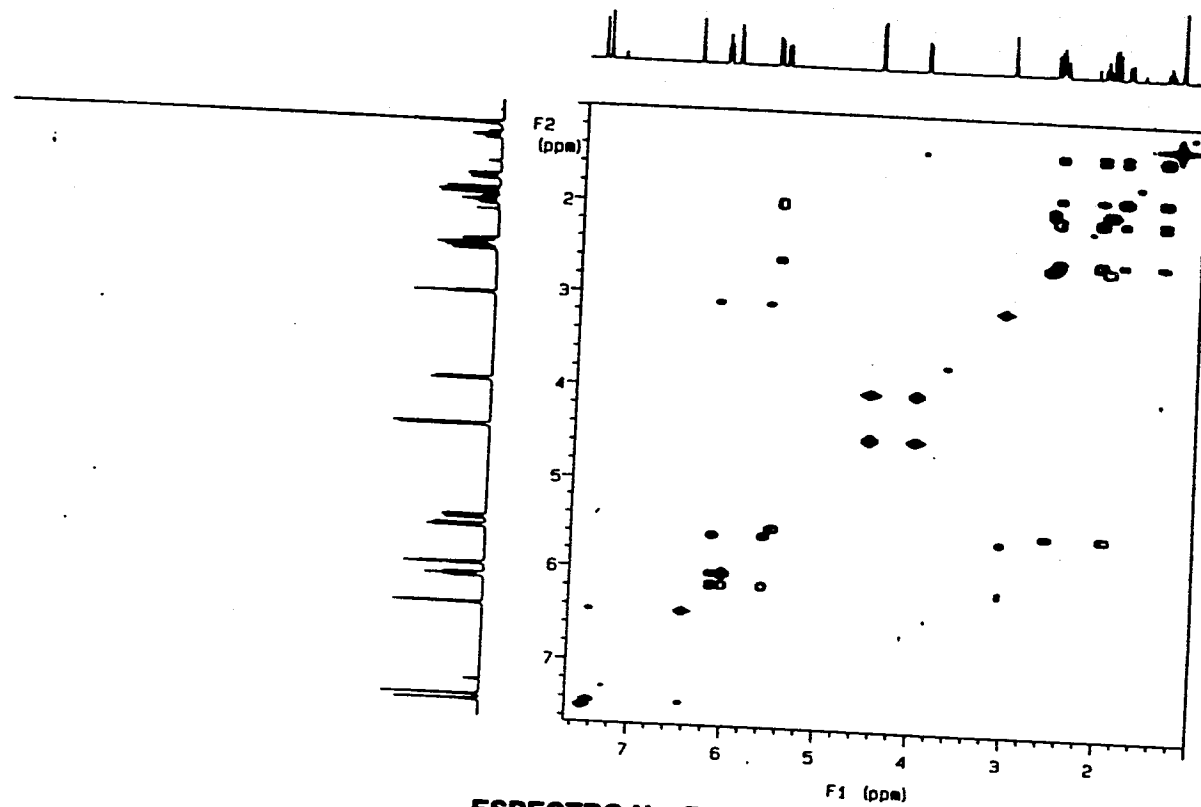
# FALLA DE ORIGEN





ESPECTRO NO. 6





ESPECTRO No. 7

BIBLIOGRAFIA

**ESTA TESIS NO DEBE  
SALIR DE LA BIBLIOTECA**

## Bibliografía

- 1.- Rzedowsky, J., Vegetación de México. Editorial Limusa (1978).
- 2.- Maximino Martínez. Las plantas Medicinales de México, 3a edición, ediciones Botas, (1944).
- 3.- A. Romo de Vivar. Productos Naturales de la Flora Mexicana. 1ª edición. Editorial Limusa (1985).
- 4.- T.A. van Beek and Ae. de Groot. Recueil des Travaux Chimiques des Pays-bas. 105, 513 (1986)
- 5.- Denise M. Hosler, J. Chem. Educ., 64, 328 (1987).
- 6.- A.G. Gonzáles, J.G. Luis, A.G. Ravel. Plantas Iberoamericanas Fuentes de Moléculas Bioactivas. II Lamiaceae (1990).
- 7.- Cronquist A., An integrated System of Classification of Flowering Plants., Columbia University Press New York, (1981).
- 8 a.- Rogelio G. Pereda Miranda, Elucidación Estructural y Estereoquímica de nuevos metabolitos secundarios aislados de Labiatae. Tesis (1988). Instituto Politécnico Nacional.
- 8 b.- Halim, A. F., Collins, R. F., J. Agric. Food Chem., , 23, 506.1975
- 9.- H. Wagner. Rev. Latinoamer. Quím. 8, 16 (1977).
- 10.- Ortega, A., Blount, J. F., Marchand, P. S., J. Chem. Soc. Perkin. Trans. I, 2505, (1982).
- 11.- Savona, G., Paternostro, M. P., Piozzi, F., Hanson, J. R., Hitchcock, P. B. and Thomas, J. A. J. Chem. Soc. Perkin Trans. I, 643, (1978)
- 12.- Jiménez, M. Moreno, E. D. y Díaz E. Rev. Latinoamer. Quím., 10 166 (1979).
- 13.- Petit G. R. Klinger H., Jorgensen N. N., Phytochemistry 5, 301, (1966)

- 14.- Baldomero Esquivel, Jorge Cárdenas, T. P. Ramamoorthy and Lydia Rodríguez Hahn. Phytochemistry **25**, 2381 (1986).
- 15.- Baldomero Esquivel Rodríguez, Estudio Quimiotaxonómico de la Sección Fulgentes del Género Salvia (Labiatae). Tesis (1986). Universidad Nacional Autónoma de México.
- 16.- T. L. Rost. M. G. Barbour. R. M. Thomson. T. E. Weler. C.R. Stocking Introducción a la Biología Vegetal. Editorial Limusa. México (1985).
- 17.- Katsura Munakata., Pure. Appl. Chem. **42**, 57 (1975).
- 18.- Información proporcionada por el M. en C. Baldomero Esquivel Rodríguez.