

**CONSTITUÍNTES QUÍMICOS E AVALIAÇÃO DAS ATIVIDADES ANTIOXIDANTE E ANTI-INFLAMATÓRIA DAS RAÍZES DE *Sabicea brasiliensis* Wernh (Rubiaceae)**

Jucilene Cavalini Batista<sup>a</sup>, Silvana Maria de Oliveira Santin<sup>a</sup>, Ivânia T. Albrecht Schuquel<sup>a</sup>, Laura Lícia Milani de Arruda<sup>b</sup>, Ciomar Aparecida Bersani-Amado<sup>b</sup>, Cecília Maria Alves de Oliveira<sup>c</sup>, Lucilia Kato<sup>c</sup>, Heleno Dias Ferreira<sup>d</sup> e Cleuza Conceição da Silva<sup>a,\*</sup>

<sup>a</sup>Departamento de Química, Universidade Estadual de Maringá, 87020-900 Maringá – PR, Brasil

<sup>b</sup>Departamento de Farmacologia e Terapêutica, Universidade Estadual de Maringá, 87020-900 Maringá – PR, Brasil

<sup>c</sup>Instituto de Química, Campus Samambaia, Universidade Federal de Goiás, 74001-970 Goiânia – GO, Brasil

<sup>d</sup>Departamento de Biologia Geral, Instituto de Ciências Biológicas, Campus Samambaia, Universidade Federal de Goiás, 74001-970 Goiânia – GO, Brasil

**Dados espectroscópicos (<sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C) substâncias de 1 a 6 isoladas de *S. brasiliensis*.**
**Ácido ursólico (1)**

Sólido branco, p. f. 253,2- 256,3 °C (lit. 269,1 °C)<sup>17</sup> RMN de <sup>1</sup>H (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ<sub>H</sub> (multiplicidade, J em Hz): 5,34 (t, 3,6, H-12); 1,05 (d, 6,4, H-29); 0,76 (d, 5,9, H-30). RMN de <sup>13</sup>C (75 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 38,8 (C-1); 29,8 (C-2); 77,7 (C-3); 39,4 (C-4); 56,2 (C-5); 19,8 (C-6); 32,1 (C-7); 39,6 (C-8); 47,7 (C-9); 36,2 (C-10); 23,2 (C-11); 121,8 (C-12); 138,4 (C-13); 42,6 (C-14); 28,3 (C-15); 23,9 (C-16); 47,9 (C-17); 53,4 (C-18); 39,2 (C-19); 39,0 (C-20); 30,8 (C-21); 37,4 (C-22); 28,3 (C-23); 16,2 (C-24); 15,0 (C-25); 16,8 (C-26); 24,4 (C-27); 181,0 (C-28); 15,0 (C-29); 21,2 (C-30).

**Ácido 5-O-cafeoilquínico (2)**

Óleo amarelo. RMN de <sup>1</sup>H (300 MHz, CD<sub>3</sub>OD): δ<sub>H</sub> (multiplicidade, J em Hz): 1,98-2,26 (m, H-2); 4,16 (dl, 3,0 Hz, H-3); 3,70 (dd, 10,0; 3,0, H-4); 5,36 (ddd, 10,0; 10,0; 4,2, H-5); 1,98-2,26 (m, H-6); 7,03 (d, 1,8, H-2'); 6,78 (d, 8,1, H-5'); 6,93 (dd, 1,8, 8,1, H-6'); 7,58 (d, 15,9, H-7') e 6,28 (d, 15,9, H-8'). RMN de <sup>13</sup>C (75 MHz, CD<sub>3</sub>OD): 39,8 (C-2); 72,3 (C-3); 74,3 (C-4); 72,0 (C-5); 38,3 (C-6); 179,1 (C-7); 127,5 (C-1'); 114,9 (C-2'); 146,4 (C-3'); 149,1 (C-4'); 116,2 (C-5'); 122,8 (C-6'); 146,8 (C-7'); 115,1 (C-8'); 168,8 (C-9').

**Ácido 4,5-O-dicafeoilquínico (3)**

Óleo amarelo. RMN de <sup>1</sup>H (300 MHz, CD<sub>3</sub>OD): δ<sub>H</sub> (multiplicidade, J em Hz): 2,05-2,35 (m, H-2 e H-6); 4,36 (ddd, 3,0; 3,0; 4,4; H-3); 5,11 (dd, 3,0; 9,1, H-4); 5,61 (ddd, 5,3; 9,1; 9,1, H-5); 7,00 (d, 2,1, H-2'); 6,73 (d, 8,1, H-5'); 6,90 (dd, 2,1; 8,1, H-6'); 7,51 (d, 15,9, H-7'); 6,28 (d, 15,9, H-8'); 7,02 (d, 2,1, H-2''); 6,74 (d, 8,1, H-5''); 6,91 (dd, 2,1; 8,4, H-6''); 7,59 (d, 15,9, H-7'') e 6,18 (d, 15,9, H-8''). RMN de <sup>13</sup>C (75 MHz, CD<sub>3</sub>OD): 76,2 (C-1); 39,4 (C-2); 69,5 (C-3); 75,8 (C-4); 69,1 (C-5); 38,4 (C-6); 177,7 (C-7); 127,7 (C-1'); 115,1 (C-2'); 149,6 (C-3'); 147,3 (C-4'); 116,5 (C-5'); 123,2 (C-6'); 147,7 (C-7'); 115,1 (C-8'); 168,9 (C-9'); 127,8 (C-1''); 115,1 (C-2''); 149,5 (C-3''); 147,1 (C-4''); 116,5 (C-5''); 123,2 (C-6''); 147,7 (C-7''); 114,6 (C-8''); 168,5 (C-9'').

**Ácido 3,5-O-dicafeoilquínico (4)**

Óleo amarelo. RMN de <sup>1</sup>H (300 MHz, CD<sub>3</sub>OD): δ<sub>H</sub> (multiplicidade, J em Hz): 2,05-2,35 (m, H-2); 5,37 (dl, 7,0, H-3); 3,96 (dd,

3,3; 7,1, H-4); 5,41 (ddd, 3,3; 7,0; 7,1, H-5); 2,05-2,35 (m, H-6); 7,06 (d, 1,5, H-2''); 6,78 (d, 8,1, H-5''); 6,98 (dd, 2,1; 8,1, H-6''); 7,61 (d, 15,9, H-7''); 6,34 (d, 15,9, H-8''); 7,05 (d, 1,5, H-2'''); 6,79 (d, 8,1, H-5'''); 6,95 (dd, 2,1; 8,1, H-6'''); 7,57 (d, 15,9, H-7''') e 6,26 (d, 15,9, H-8'''). RMN de <sup>13</sup>C (75 MHz, CD<sub>3</sub>OD): 74,8 (C-1); 38,4 (C-2); 72,1 (C-3); 70,7 (C-4); 72,6 (C-5); 36,1 (C-6); 177,3 (C-7); 127,9 (C-1''); 115,1 (C-2''); 149,6 (C-3''); 147,7 (C-4''); 116,5 (C-5''); 123,2 (C-6''); 147,6 (C-7''); 115,6 (C-8''); 168,3 (C-9''); 127,6 (C-1'''); 115,2 (C-2'''); 149,6 (C-3'''); 147,6 (C-4'''); 116,5 (C-5'''); 123,2 (C-6'''); 147,6 (C-7'''); 114,7 (C-8'''); 168,3 (C-9''').

**Daucosterol (5)**

Sólido branco, p. f. 265,1-267,4 °C (lit. 287-289 °C)<sup>18</sup> RMN de <sup>1</sup>H (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ<sub>H</sub> (multiplicidade, J em Hz): 1,06 (m, H-1<sub>a</sub>); 1,84 (m, H-1<sub>b</sub>); 1,51-1,63 (m, H-2<sub>a</sub>); 1,86-1,90 (m, H-2<sub>b</sub>); 3,51-3,57 (m, H-3); 2,17-2,28 (m, H-4<sub>a</sub>); 2,32-2,40 (m, H-4<sub>b</sub>); 5,33 (d; 5,4, H-6); 1,51-1,56 (m, H-7<sub>a</sub>); 1,92-1,97 (m, H-7<sub>b</sub>); 1,37 (m, H-8); 0,88 (m, H-9); 1,41 (m, H-11); 1,15 (m, H-12<sub>a</sub>); 1,97-2,00 (m, H-12<sub>b</sub>); 0,96 (m, H-14); 1,01-1,09 (m, H-15<sub>a</sub>); 1,51-1,62 (m, H-15<sub>b</sub>); 1,27-1,35 (m, H-16<sub>a</sub>); 1,80 (m, H-16<sub>b</sub>); 1,05 (m, H-17); 0,67 (s, H-18); 0,97 (s, H-19); 1,35-1,41 (m, H-20); 0,88 (d, 6,5, H-21); 1,08 (m, H-22<sub>a</sub>); 1,33 (m, H-22<sub>b</sub>); 1,15-1,17 (m, H-23); 0,96 (m, H-24); 1,61-1,67 (m, H-25); 0,77 (d, 6,7, H-26); 0,82 (d, 6,9, H-27); 1,29 (m, H-28); 0,88 (m, H-29); 4,35 (d, 7,8, H-1'); 3,17 (m, H-2'); 3,35 (m, H-3'); 3,33 (m, H-4'); 3,25 (m, H-5'); 3,69 (dd, 4,7; 12,0, H-6'<sub>a</sub>) e 3,80 (dd, 2,9; 12,0, H-6'<sub>b</sub>). RMN de <sup>13</sup>C (75 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 37,2 (C-1); 30,0 (C-2); 79,5 (C-3); 39,0 (C-4); 140,8 (C-5); 122,5 (C-6); 32,4 (C-7); 32,4 (C-8); 50,7 (C-9); 37,7 (C-10); 21,5 (C-11); 40,2 (C-12); 42,8 (C-13); 57,2 (C-14); 24,7 (C-15); 28,6 (C-16); 56,5 (C-17); 12,1 (C-18); 19,6 (C-19); 36,6 (C-20); 19,1 (C-21); 34,4 (C-22); 26,4 (C-23); 46,3 (C-24); 29,6 (C-25); 19,3 (C-26); 20,1 (C-27); 23,5 (C-28); 12,2 (C-29); 101,6 (C-1''); 74,0 (C-2''); 76,5 (C-3''); 70,6 (C-4''); 77,0 (C-5'') e 62,1 (C-6'').

**Escopoletina (6)**

Óleo viscoso amarelo. RMN de <sup>1</sup>H (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ<sub>H</sub> (multiplicidade, J em Hz): 6,29 (d, 9,3, H-3); 7,62 (d, 9,3, H-4); 6,85 (s, H-5); 6,92 (s, H-8); 3,96 (s, O-CH<sub>3</sub>). RMN de <sup>13</sup>C (75 MHz, CDCl<sub>3</sub>): 161,8 (C-2); 113,6 (C-3); 143,6 (C-4); 107,7 (C-5); 143,6 (C-6); 149,9 (C-7); 103,4 (C-8); 149,9 (C-9); 111,7 (C-10) e 56,3 (O-CH<sub>3</sub>).

\*e-mail: ccsilva@uem.br

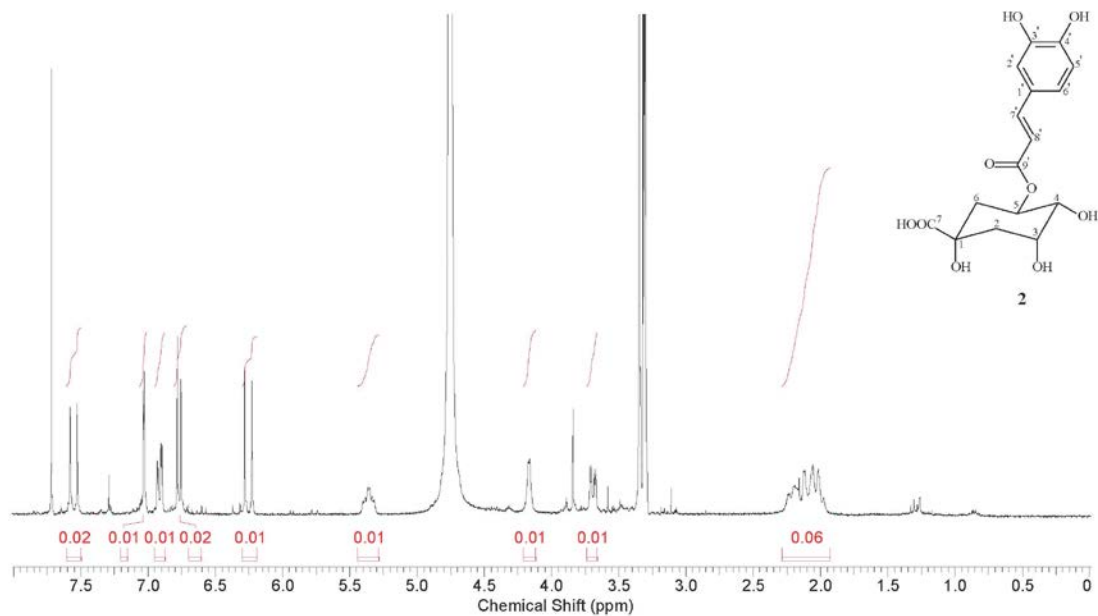


Figura 1S. Espectro de RMN de  $^1\text{H}$  ( $\text{CD}_3\text{OD}$ ; 300 MHz) da substância 2

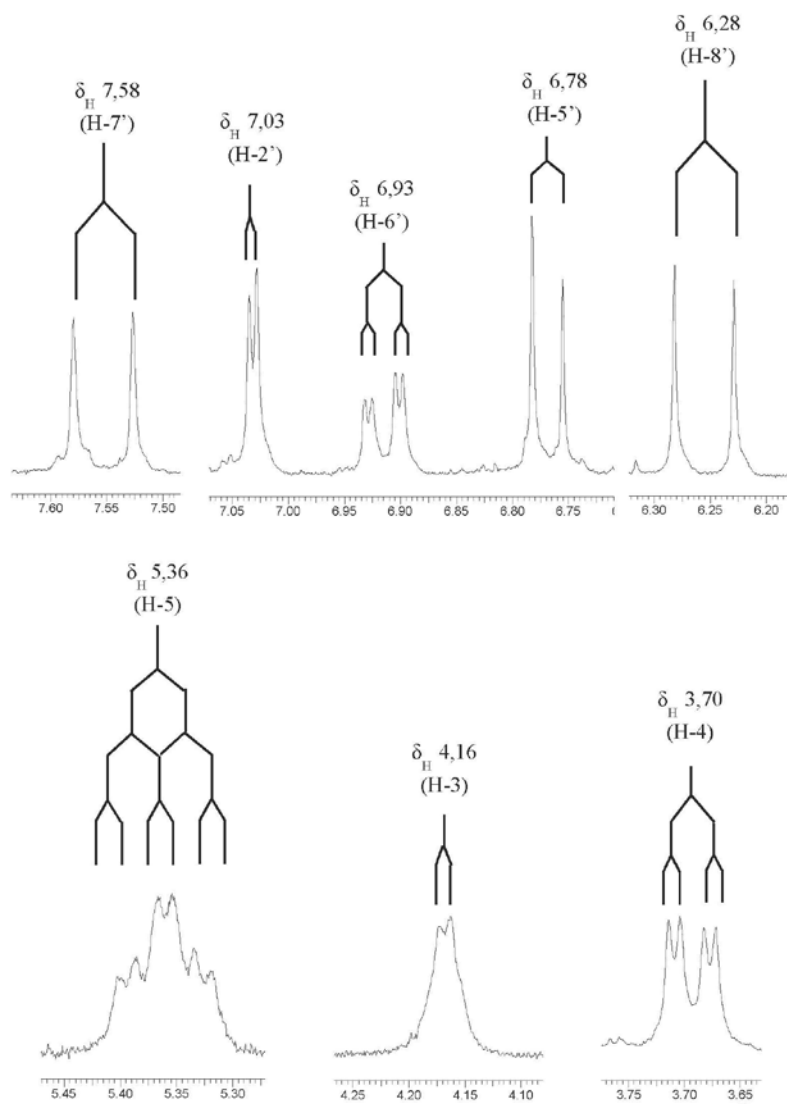


Figura 2S. Expansão dos sinais do espectro de  $^1\text{H}$  ( $\text{CD}_3\text{OD}$ ; 300 MHz) da substância 2

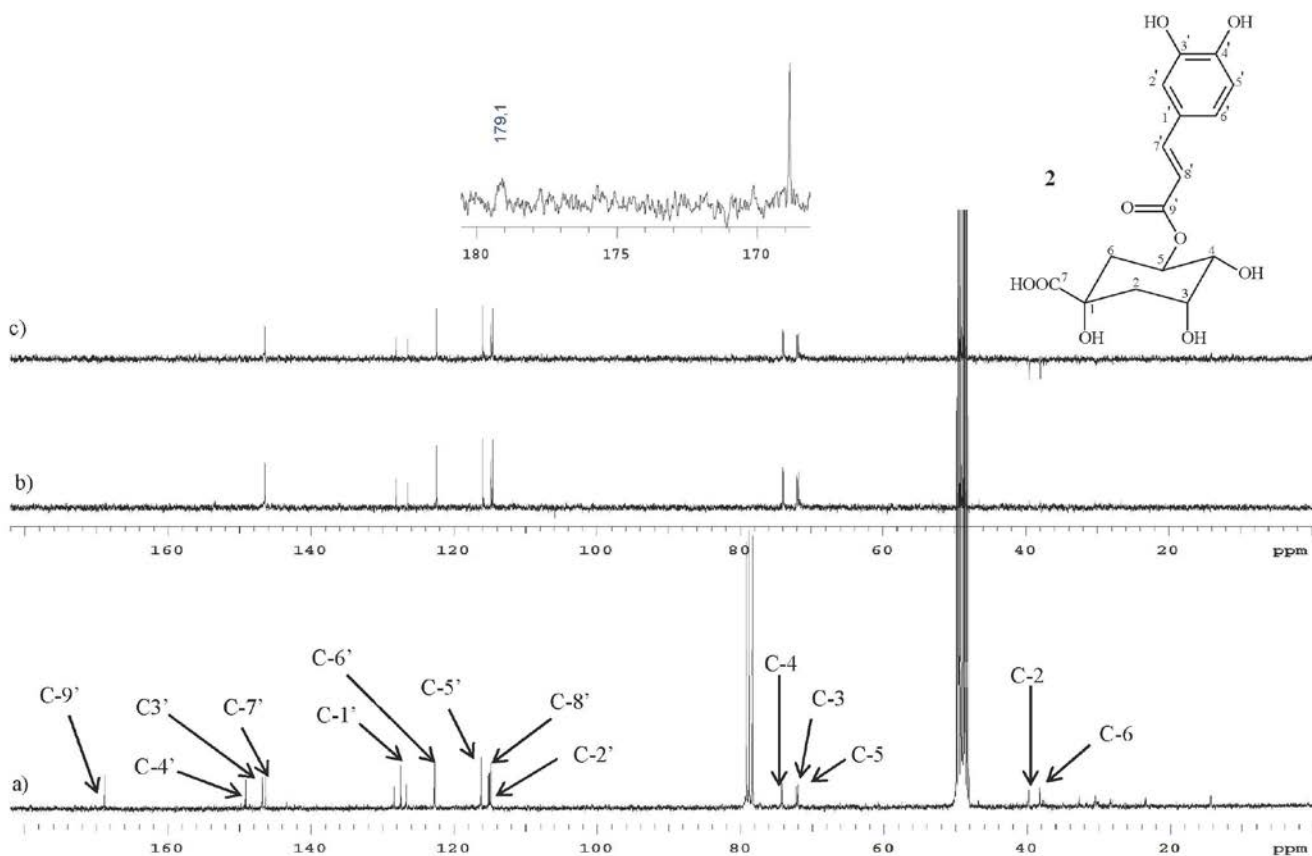


Figura 3S. Espectro de RMN de  $^{13}\text{C}$  (a), DEPT 135° (b) e DEPT 90° (c) ( $\text{CD}_3\text{OD}$ ; 75 MHz) da substância 2

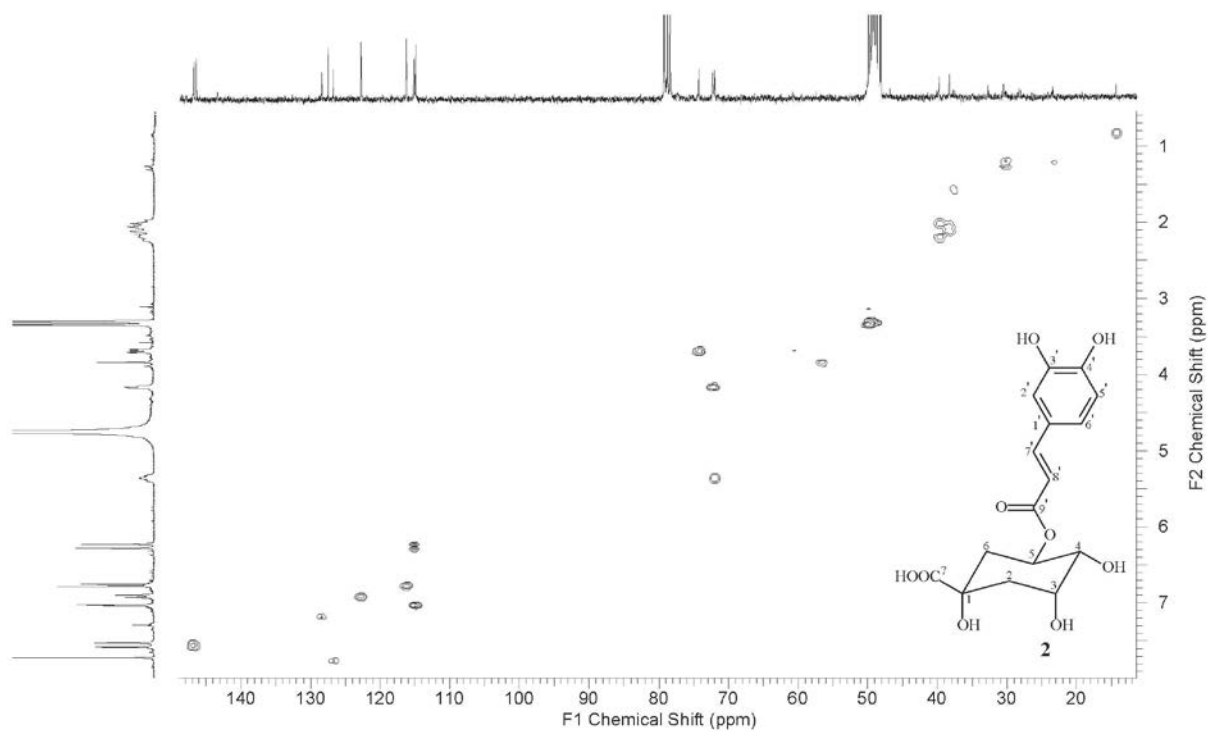
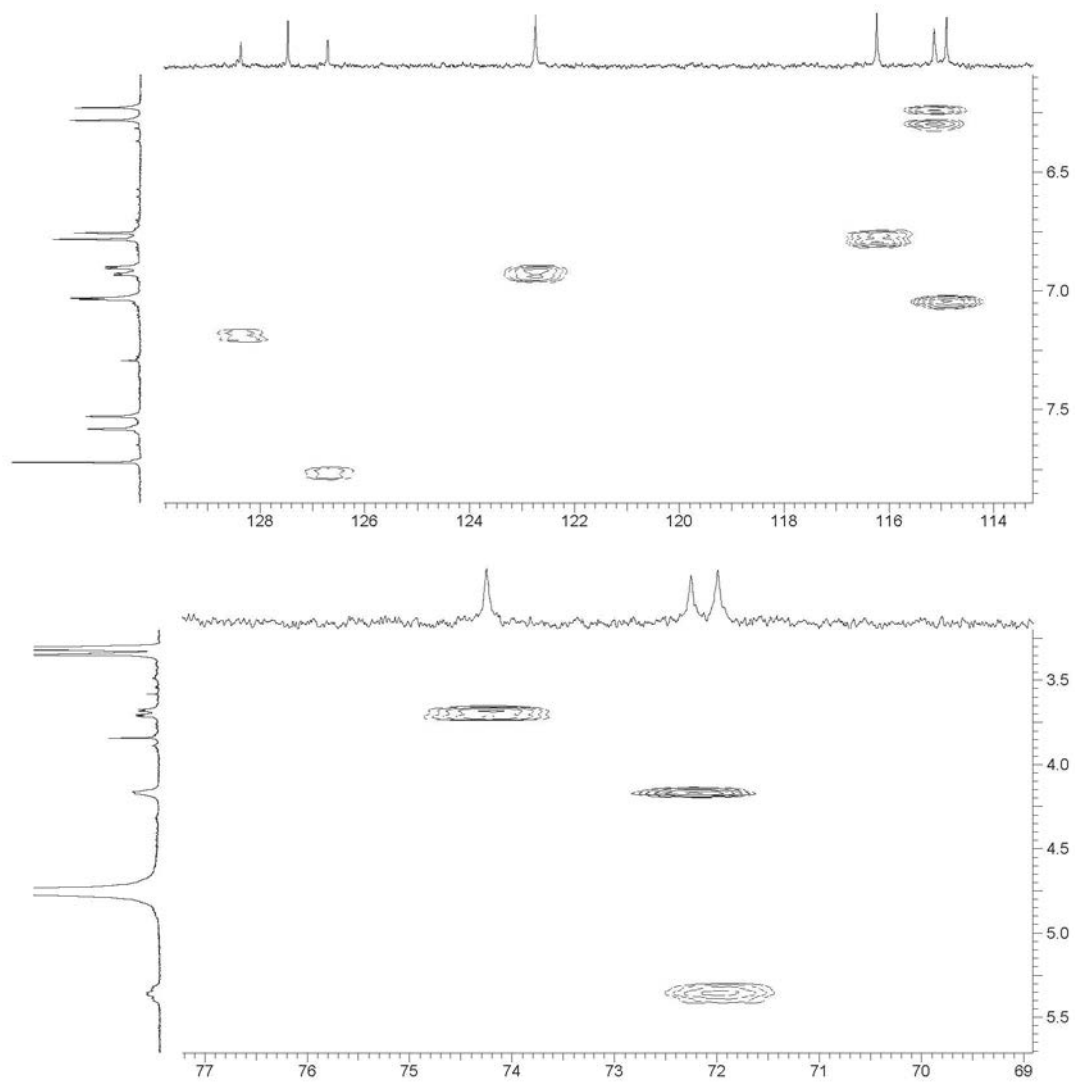
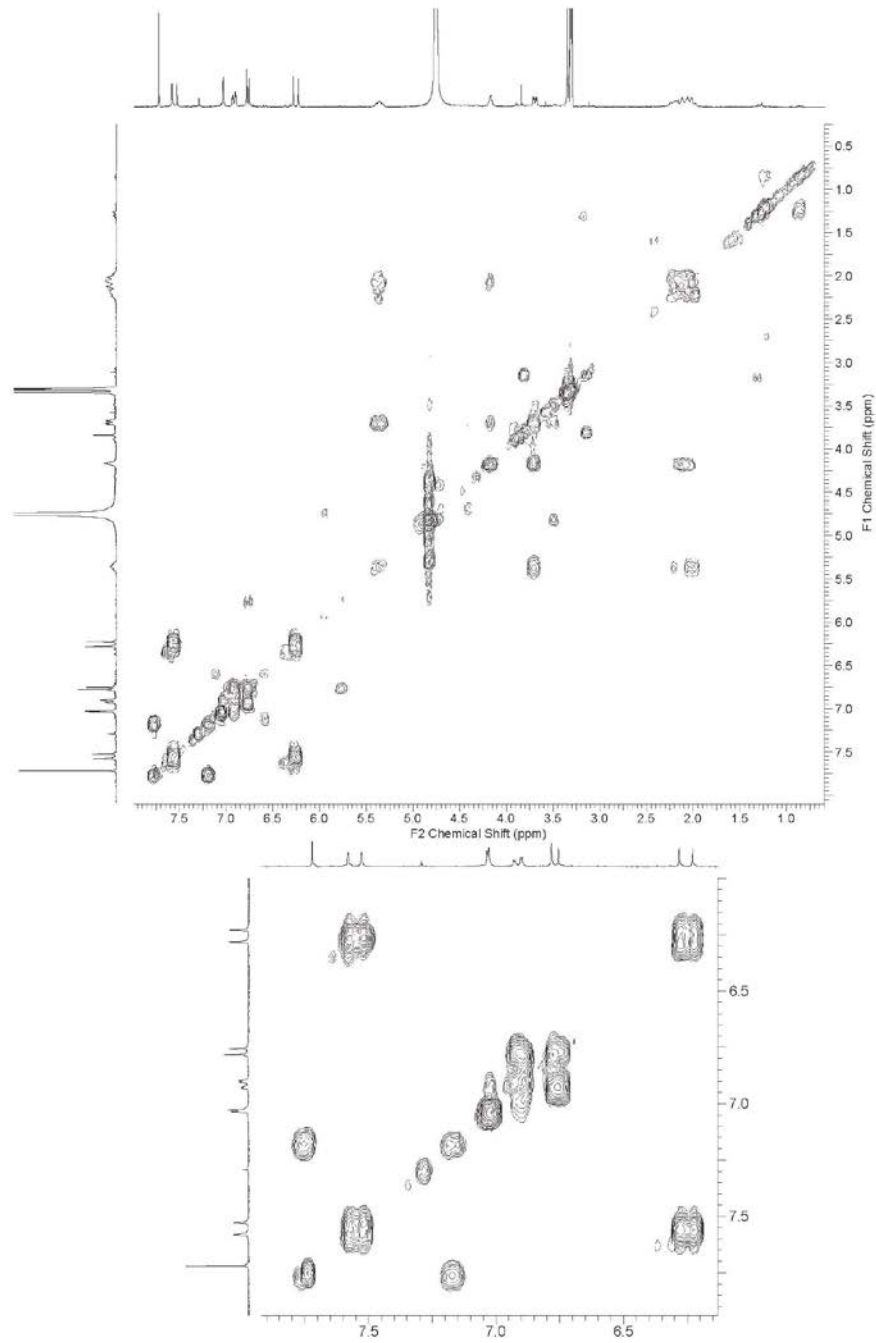


Figura 4S. Mapa de correlação heteronuclear HSQC ( $^1\text{H} \times ^{13}\text{C}$ ) da substância 2



**Figura 5S.** Expansões do mapa de correlação heteronuclear HSQC ( $^1\text{H}$  x  $^{13}\text{C}$ ) da substância 2



**Figura 6S.** Mapa de correlação homonuclear COSY ( $^1\text{H} \times ^1\text{H}$ ) (a) e expansão (b) para a substância 2

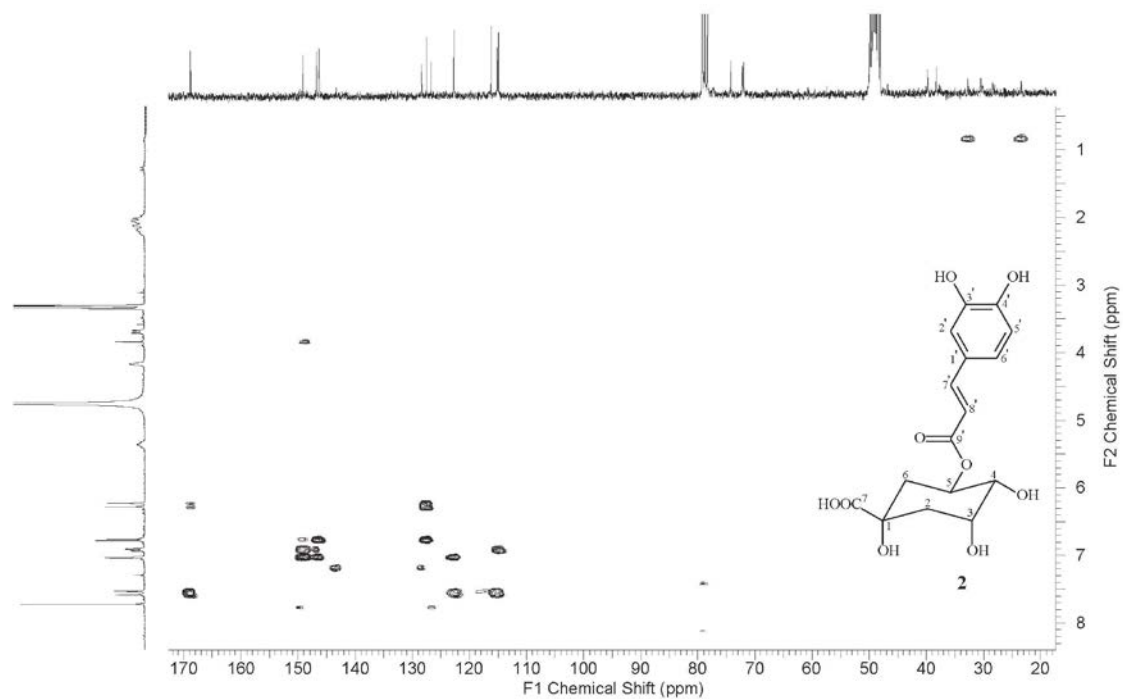


Figura 7S. Mapa de correlação heteronuclear HMBC ( $^1\text{H} \times ^{13}\text{C}$ ) da substância 2

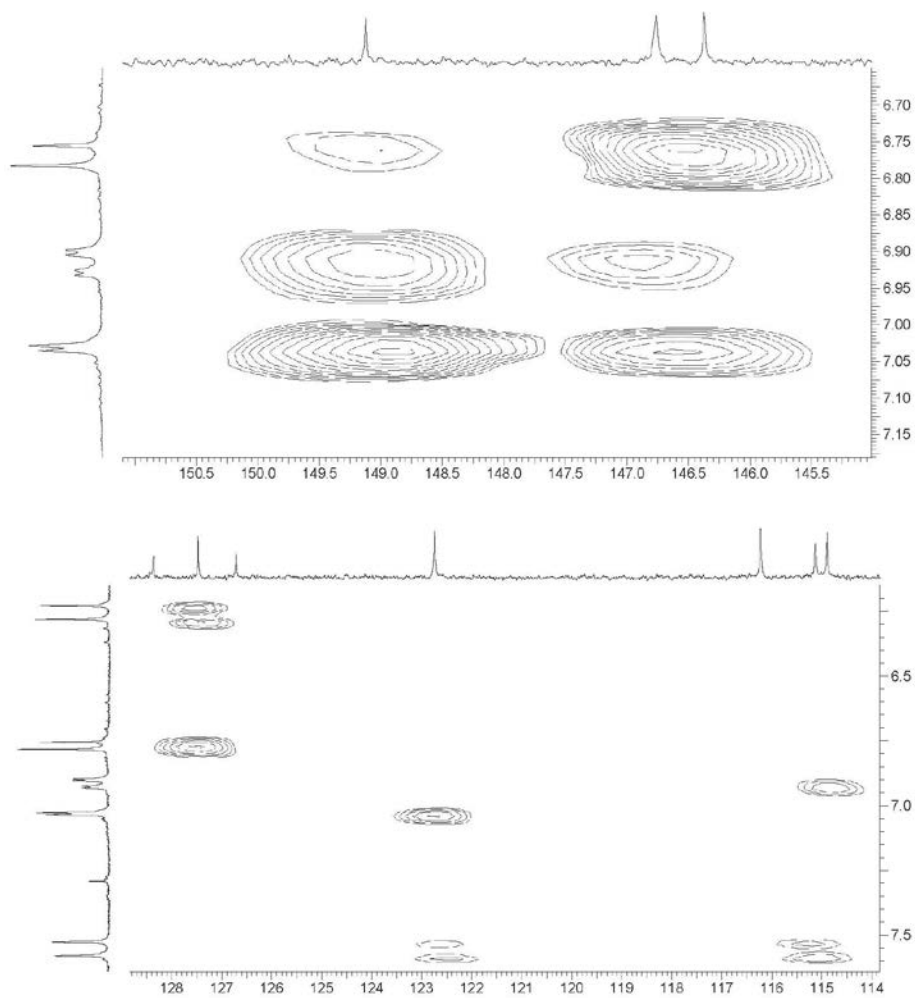


Figura 8S. Expansões do mapa de correlação heteronuclear HMBC ( $^1\text{H} \times ^{13}\text{C}$ ) da substância 2

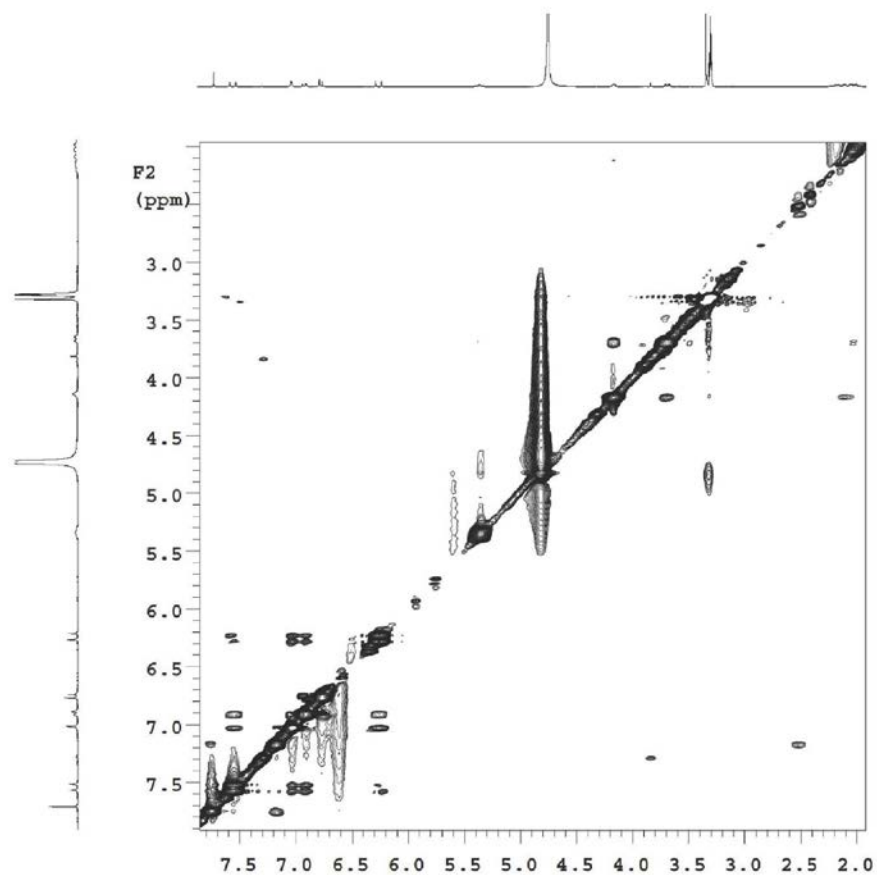


Figura 9S. Mapa de correlação espacial NOESY ( $^1\text{H} \times ^1\text{H}$ ) (a) e expansão (b) da substância 2

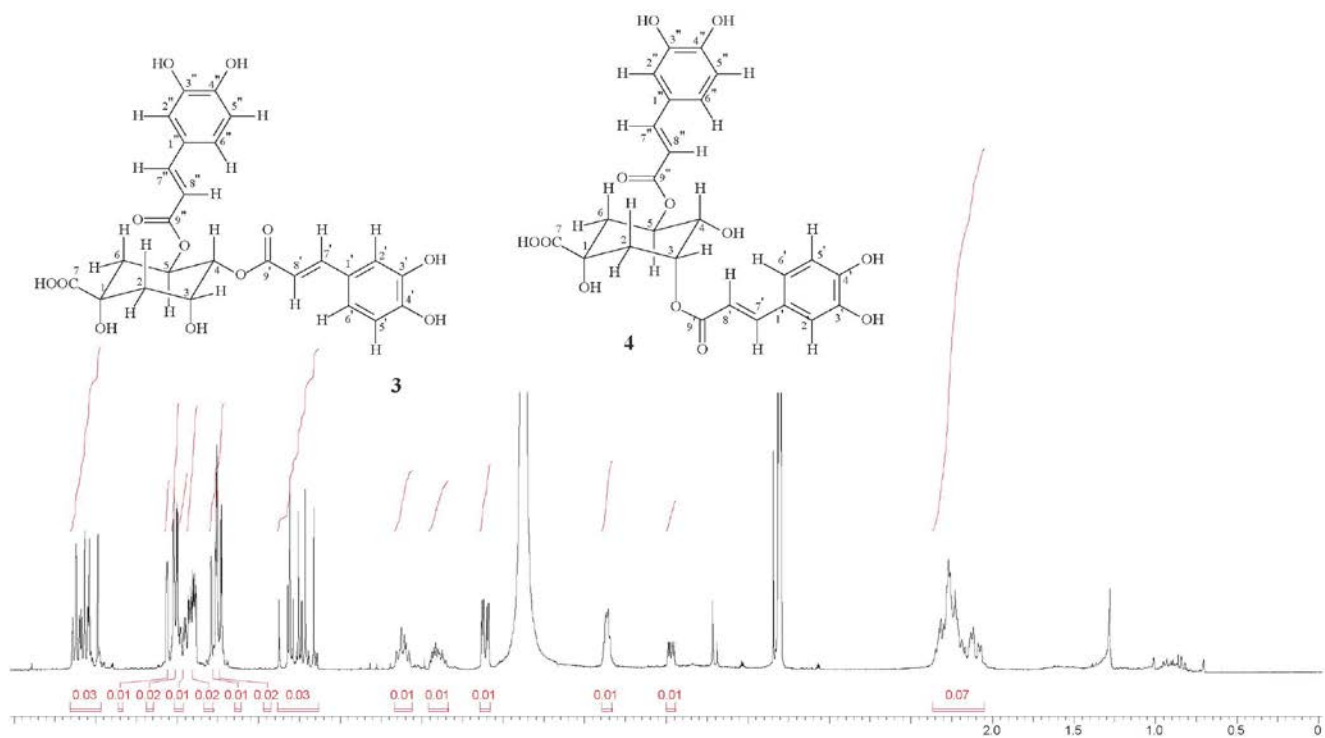


Figura 10S. Espectro de RMN de  $^1\text{H}$  ( $\text{CD}_3\text{OD}$ ; 300 MHz) das substâncias 3 e 4

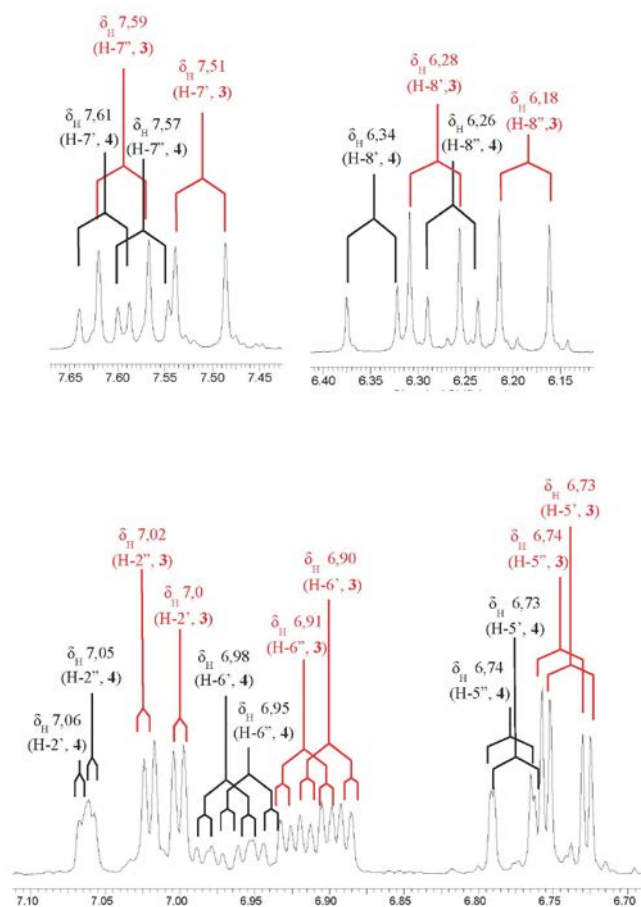


Figura 11S. Expansão dos sinais do espectro de  $^1\text{H}$  ( $\text{CD}_3\text{OD}$ ; 300 MHz) das substâncias **3** e **4** para o grupo cafeico

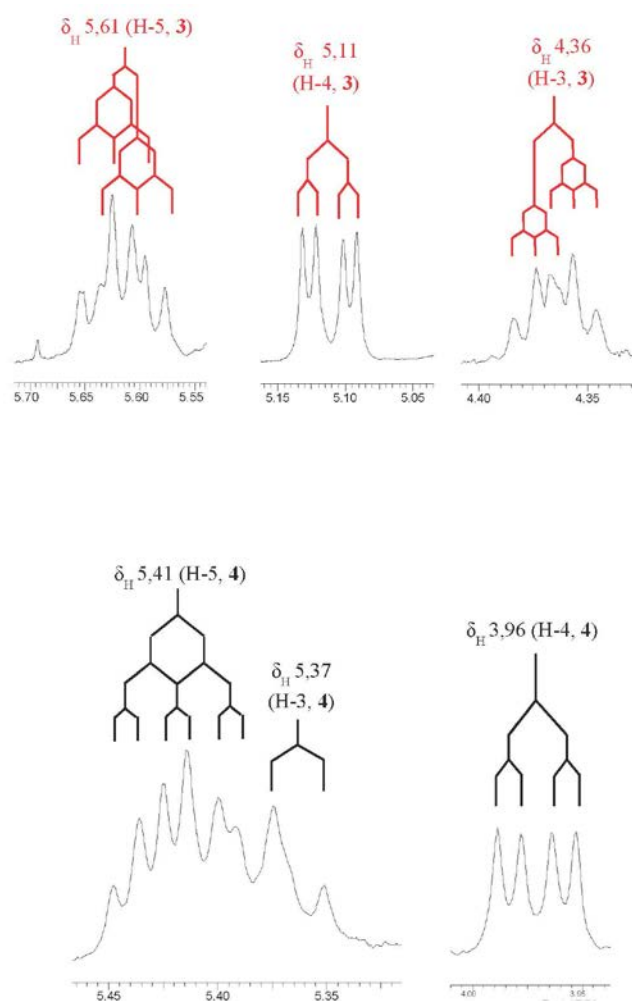


Figura 12S. Expansão dos sinais do espectro de  $^1\text{H}$  ( $\text{CD}_3\text{OD}$ ; 300 MHz) das substâncias **3** e **4** para o grupo quínico

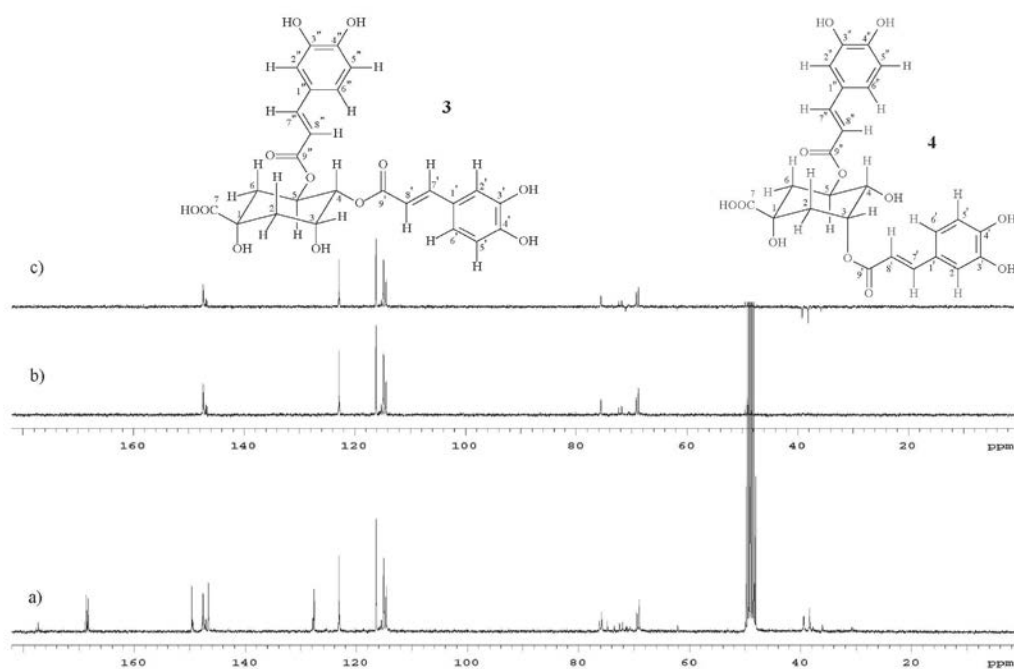


Figura 13S. Espectro de RMN de  $^{13}\text{C}$  (a), DEPT  $135^\circ$  (b) e DEPT  $90^\circ$  (c) ( $\text{CD}_3\text{OD}$ ; 75 MHz) das substâncias **3** e **4**



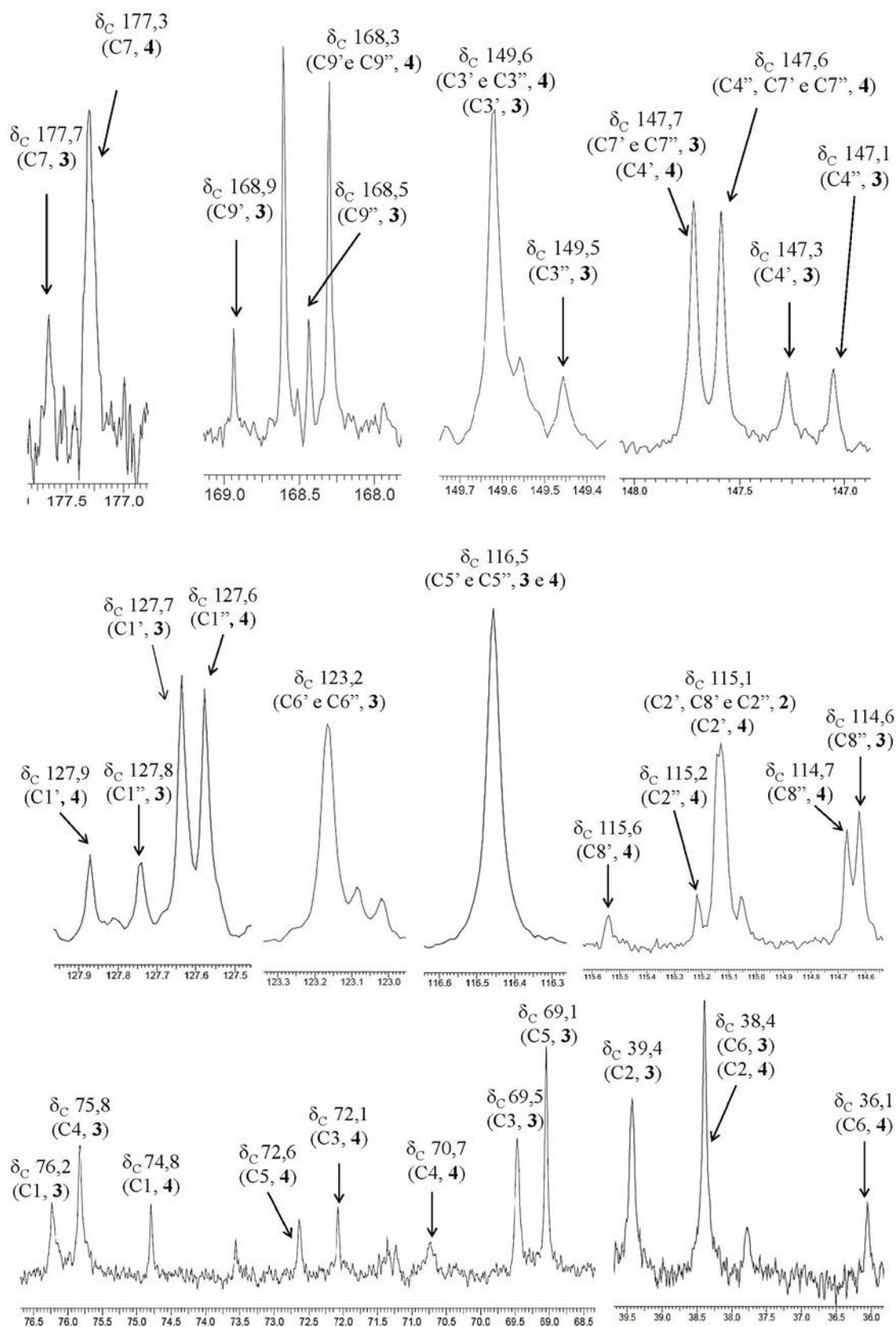


Figura 14S. Expansões dos sinais do espectro de  $^{13}\text{C}$  ( $\text{CD}_3\text{OD}$ ; 75 MHz) na região do grupo quínico das substâncias **3** e **4**

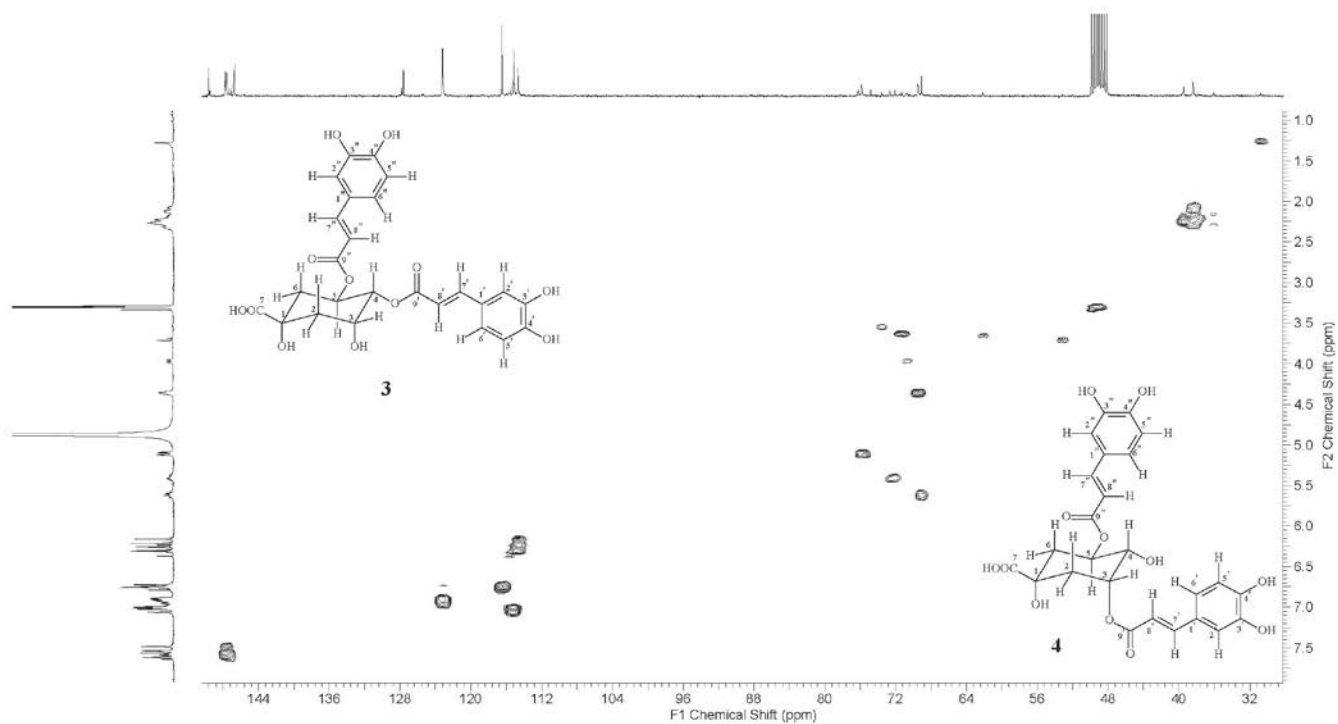


Figura 15S. Mapa de correlação heteronuclear HSQC ( $^1\text{H} \times ^{13}\text{C}$ ) das substâncias 3 e 4

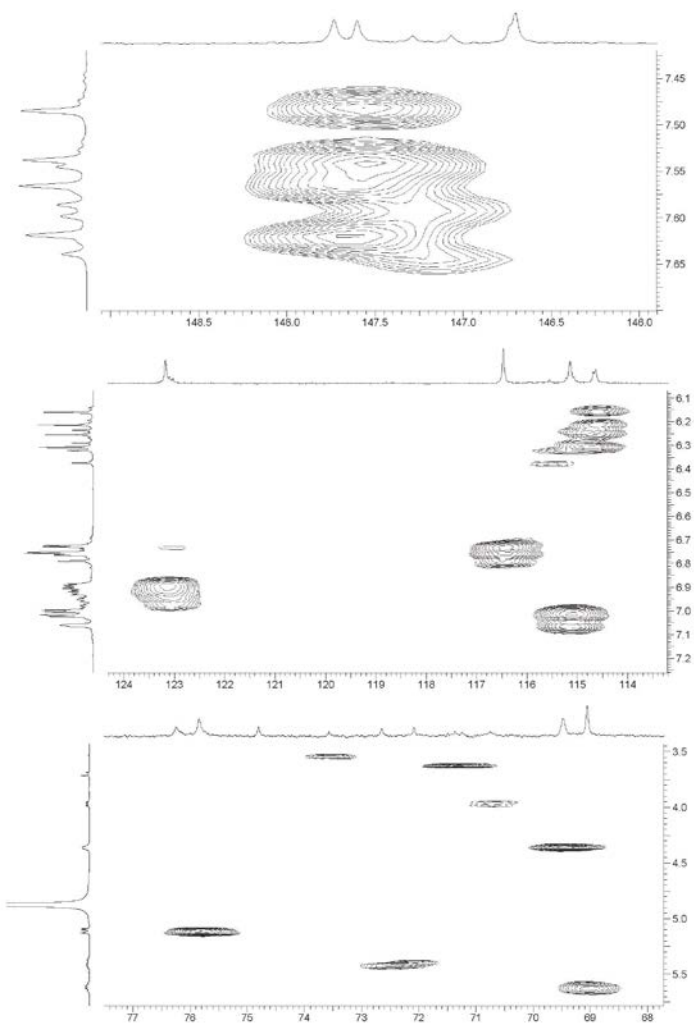


Figura 16S. Expansões do mapa de correlação heteronuclear HSQC ( $^1\text{H} \times ^{13}\text{C}$ ) das substâncias 3 e 4

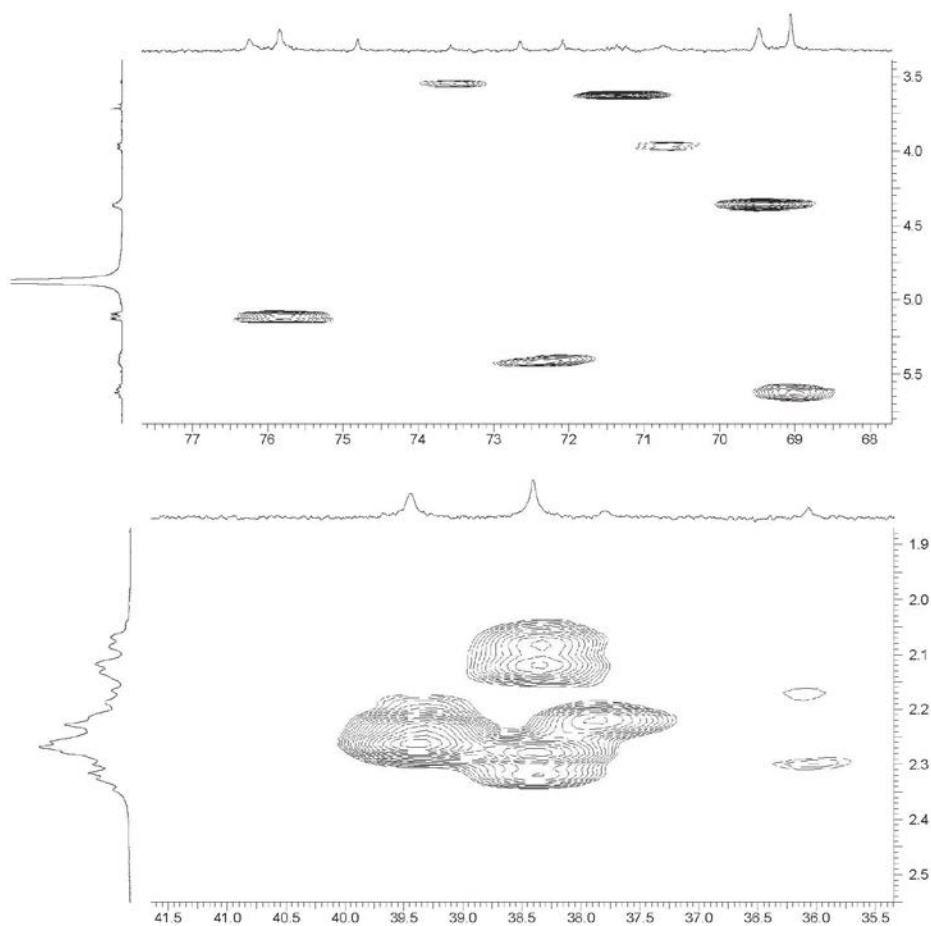


Figura 17S. Expansões do mapa de correlação heteronuclear HSQC ( $^1\text{H} \times ^{13}\text{C}$ ) das substâncias 3 e 4

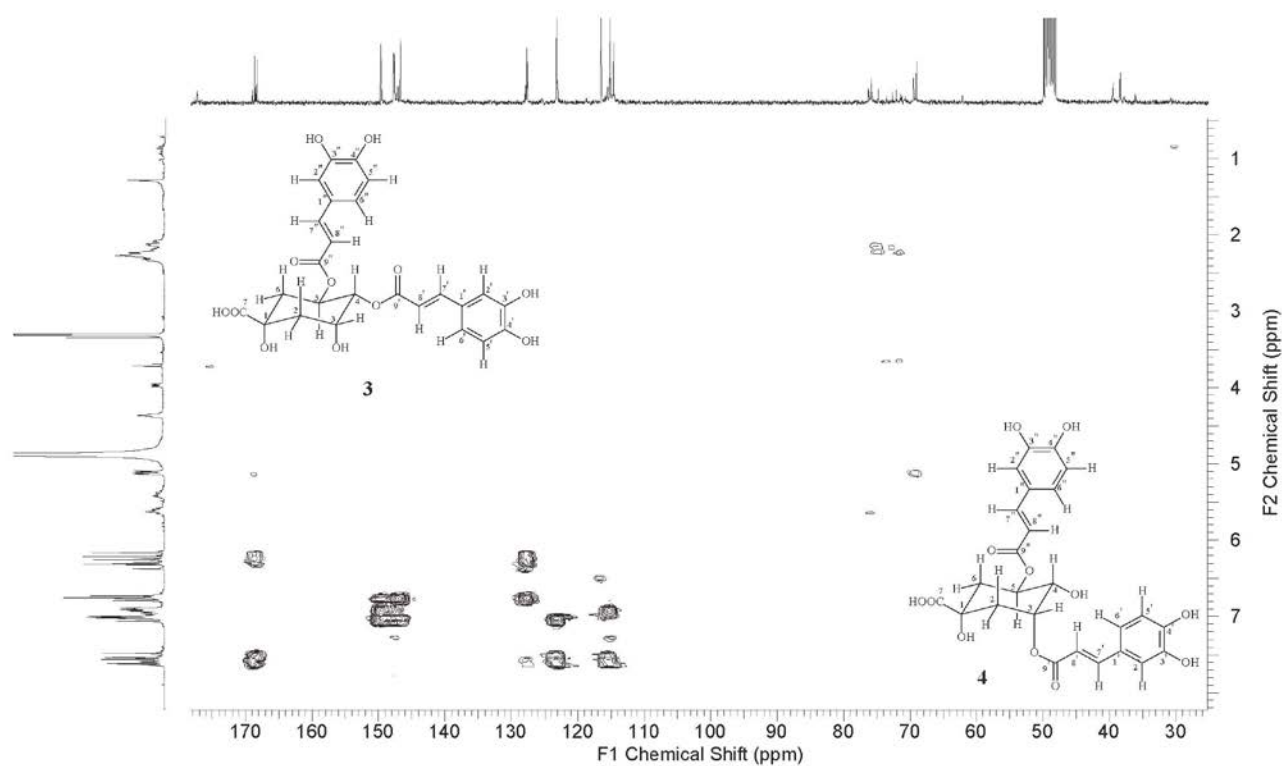
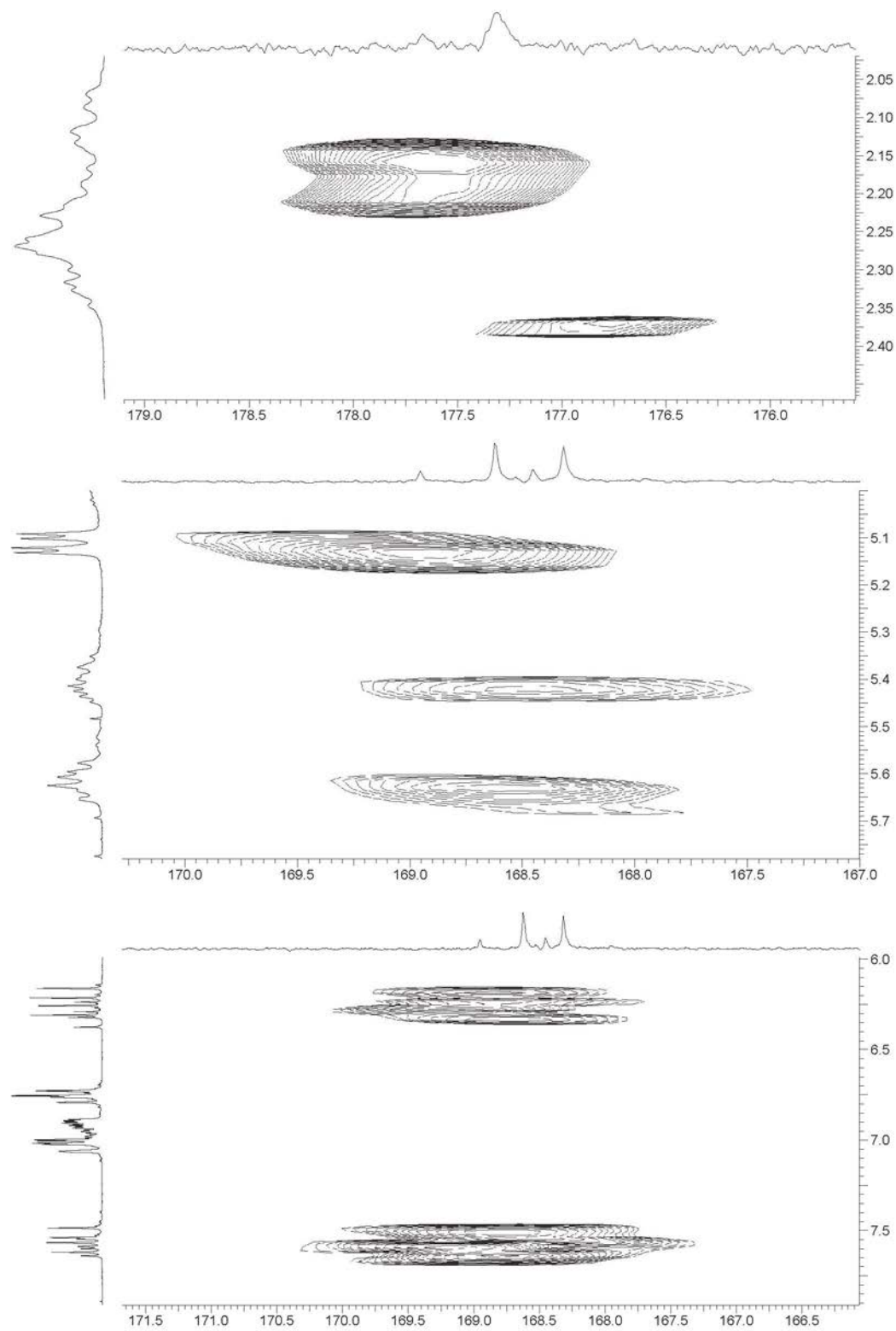


Figura 18S. Mapa de correlação heteronuclear HMBC ( $^1\text{H} \times ^{13}\text{C}$ ) das substâncias 3 e 4



**Figura 19S.** Expansões do mapa de correlação heteronuclear HMBC ( $^1\text{H} \times ^{13}\text{C}$ ) das substâncias 3 e 4

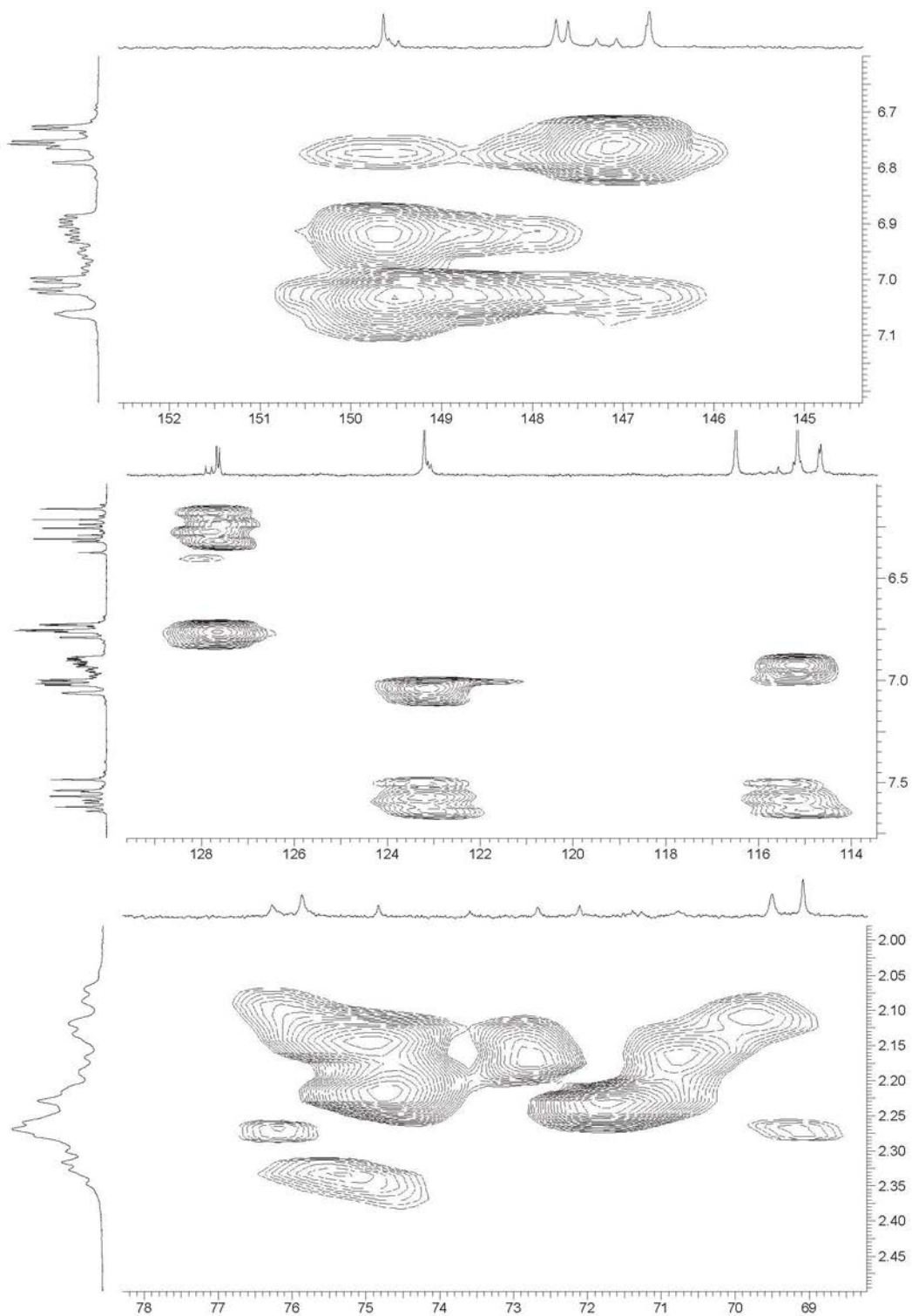


Figura 20S. Expansão do mapa de correlação heteronuclear HMBC ( $^1\text{H} \times ^{13}\text{C}$ ) das substâncias 3 e 4

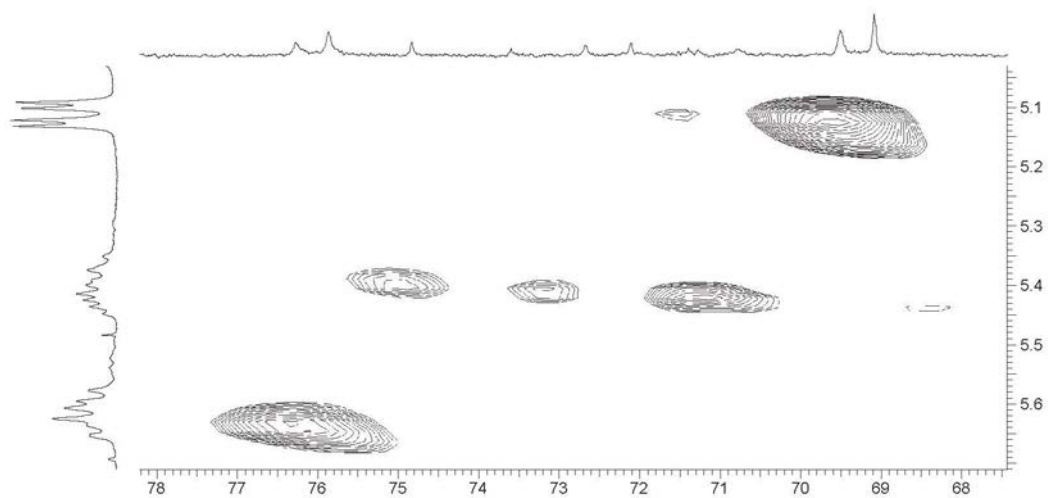


Figura 21S. Expansão do mapa de correlação heteronuclear HMBC ( $^1\text{H} \times ^{13}\text{C}$ ) das substâncias 3 e 4

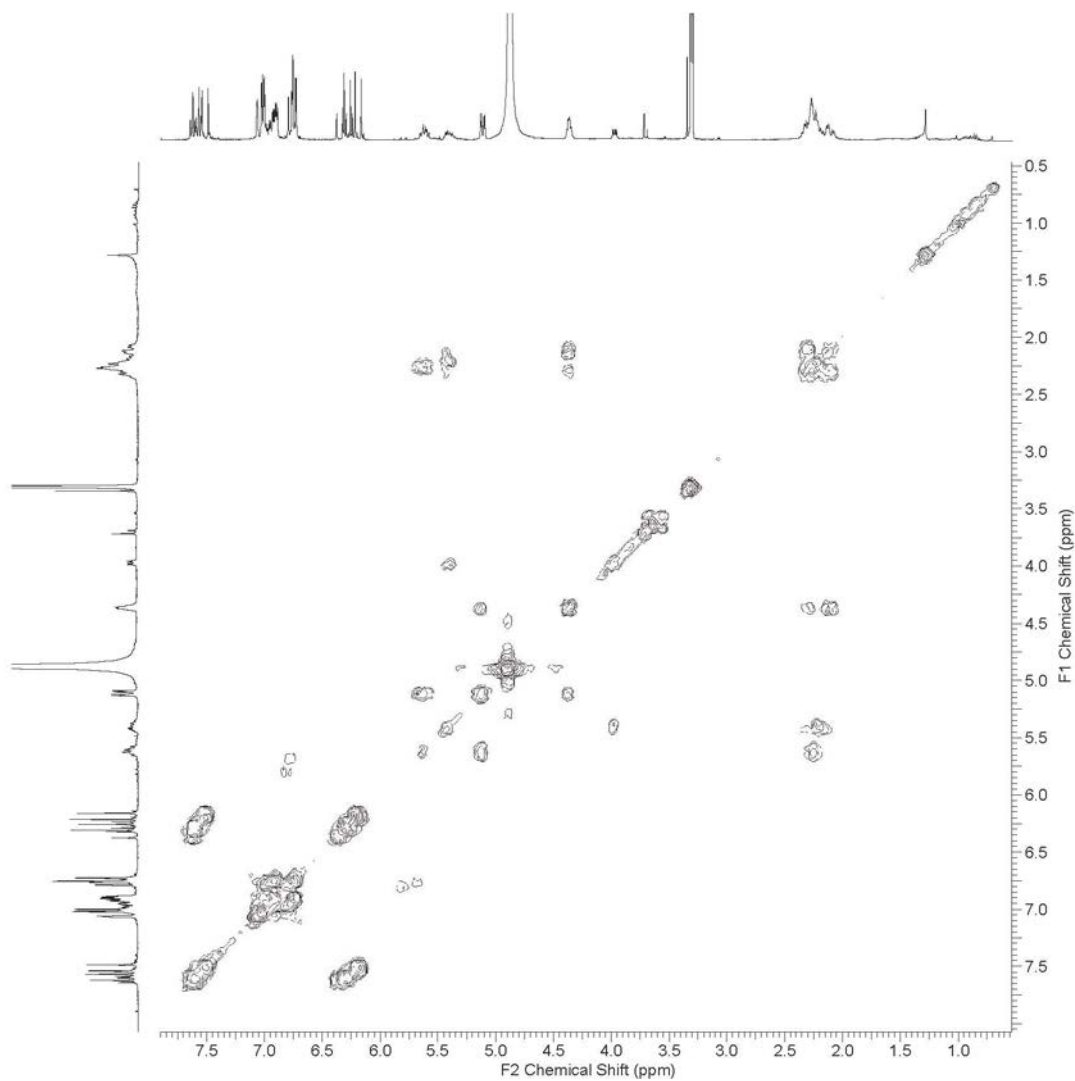


Figura 22S. Mapa de correlação homonuclear COSY ( $^1\text{H} \times ^1\text{H}$ ) das substâncias 3 e 4

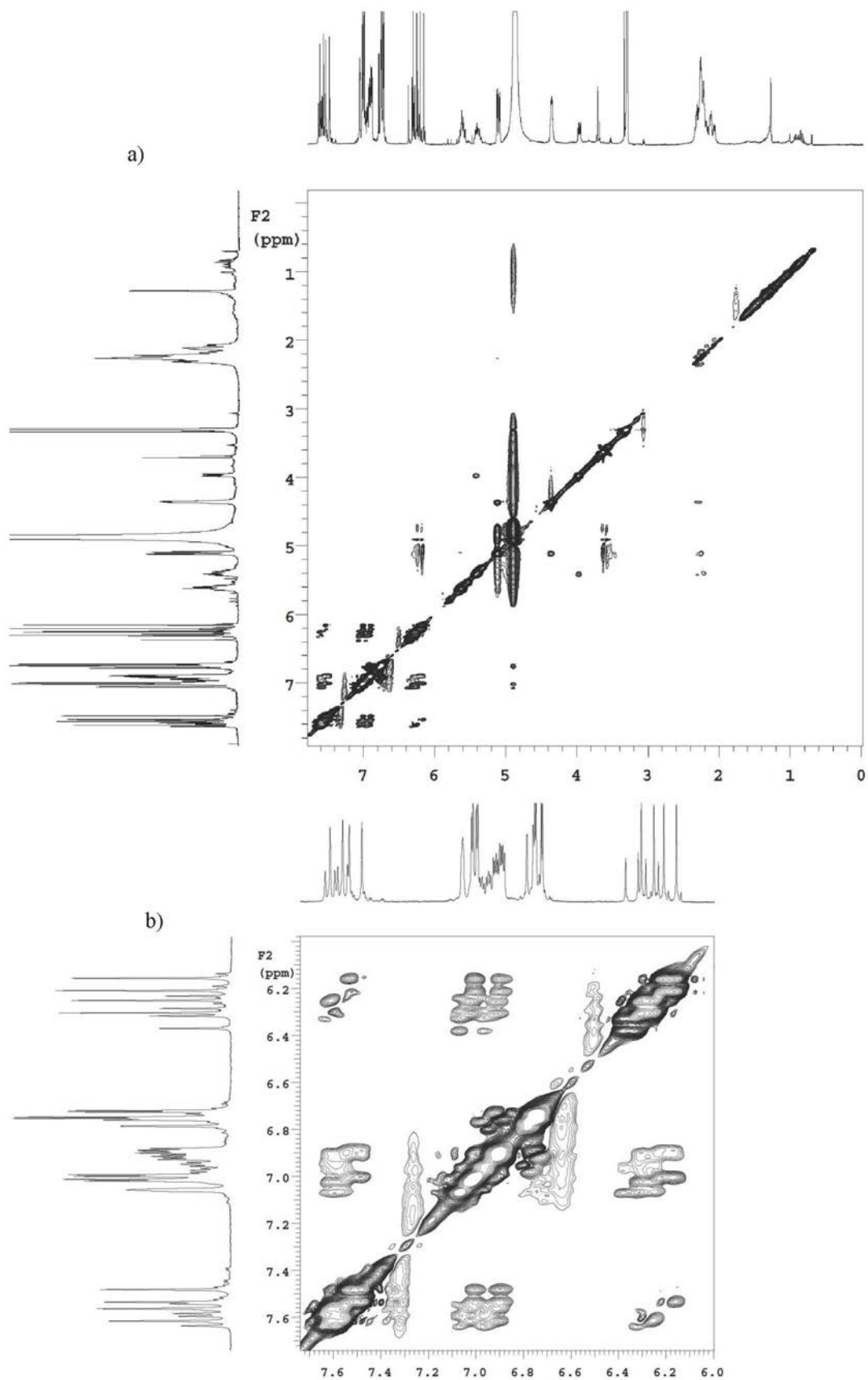


Figura 23S. Mapa de correlação espacial NOESY ( $^1\text{H} \times ^1\text{H}$ ) (a) e expansão (b) das substâncias 3 e 4