

Mario J. Basterrechea Rey, Anselmo Ferrer Hernández, Míriam Calzadilla González, Amado Enrique Navarro,  
Carlos Pérez

Componentes esteroidales del *solanum chamaecanthum* Griseb. Parte II. Chamagenina, una nueva  
sapogenina esteroideal

Ciencia Ergo Sum, vol. 7, núm. 3, noviembre, 2000

Universidad Autónoma del Estado de México

México

Available in: <http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=10401908>



*Ciencia Ergo Sum*,

ISSN (Printed Version): 1405-0269

[ciencia.ergosum@yahoo.com.mx](mailto:ciencia.ergosum@yahoo.com.mx)

Universidad Autónoma del Estado de México

México

[How to cite](#)

[Complete issue](#)

[More information about this article](#)

[Journal's homepage](#)

[www.redalyc.org](http://www.redalyc.org)

Non-Profit Academic Project, developed under the Open Acces Initiative

# Componentes esteroidales del *Solanum chamaecanthum* griseb. Parte II. Chamagenina, una nueva sapogenina esteroideal

MARIO J. BASTERRECHEA REY,<sup>\*,\*\*</sup> ANSELMO FERRER HERNÁNDEZ,<sup>\*\*\*</sup> MÍRIAM CALZADILLA GONZÁLEZ,<sup>\*,\*\*\*\*</sup>  
AMADO ENRIQUE NAVARRO FRÓMETA<sup>\*\*\*\*</sup> Y CARLOS PÉREZ<sup>\*</sup>

Recepción: 29 de octubre de 1999  
Aceptación: 09 de febrero del 2000

## Steroidal Components of *Solanum Chamaecanthum* Griseb. Part II. A New Steroidal Sapogenin

**Abstract.** *A new spirostane sapogenin named chamagenin has been isolated from the leaves and stems of Solanum chamaecanthum, and its structure has been elucidated by spectral data as (25R)-spirost-5-en-3 $\beta$ ,15 $\alpha$ -diol.*

**Palabras clave:** *solanum, esteroidales, (25R)-spirost-5-en-3 $\beta$ ,15 $\alpha$ -diol, espectroscopía.*

### Introducción

El género *Solanum* ha sido estudiado como posible fuente de materias primas esteroidales para la industria de medicamentos. El *S. chamaecanthum* es una planta que crece en Cuba y no había sido estudiada anteriormente. En el presente trabajo reportamos el aislamiento y la elucidación estructural de una nueva sapogenina esteroideal que denominamos chamagenina.

\* Universidad Autónoma del Estado de México, Facultad de Química, Paseo Colón esq. con Paseo Tollocan C. P. 50000, Toluca, México. Teléfono: (7) 217 41 20, fax: 217 38 90. Correo electrónico: mario\_b@yahoo.es

\*\* Facultad de Química, Universidad de La Habana, Cuba.

\*\*\* Centro de Biomateriales, Universidad de La Habana, Cuba.

Correo electrónico: anselmo@biomat.uh.cu

\*\*\*\* Instituto de Materiales y Reactivos, Universidad de La Habana, Cuba.

### I. Parte experimental

El *S. chamaecanthum* Griseb fue colectado en el municipio Guira de Melena, provincia de La Habana, Cuba, en 1983, 1988 y 1995. Fue identificado por el Dr. A. Areces y un espécimen de la misma se encuentra conservado en el Herbario del Jardín Botánico de Cuba, en La Habana.

Los tallos y hojas del *Solanum chamaecanthum* Griseb, secos y molidos (750g) fueron extraídos con cloroformo y posteriormente con etanol. El extracto alcohólico fue concentrado hasta sirope y disuelto en ácido acético al 20%. Se extrajo con benceno: éter etílico (1:1), se saturó con NaCl y se extrajo con *n*-butanol. El extracto butanólico fue evaporado hasta sirope e hidrolizado con HCl 3 mol L<sup>-1</sup> en etanol (1:1) durante 3 horas; se vertió sobre igual volumen de agua y se extrajo con cloroformo. Este extracto clorofórmico (15.3g) fue cromatografiado en columna de sílica gel tipo 60 de <230 mesh y una presión de 2 atmósferas. El progreso de la separación fue seguido mediante cromatografía de capa delgada de sílica gel G (cloroformo: metanol 27:3). La elusión con cloroformo: metanol (95:5) produjo 255 mg de chamagenina. Se cristalizó de acetona en agujas de p.f. 204-5°C y  $[\alpha]_{D}^{20} -79^{\circ}$  (c = 0.5 cloroformo).

EMIE 70 ev m/z (int. rel.%): 430(10), 412(17), 397(3), 371(2), 361(2), 358(4), 316(6), 315(18), 301(2), 299(11), 298(19), 287(1), 283(5), 269(5), 265(8), 251(6), 168(66), 139(100), 126(73), 115(34).

EMIE (derivado diacetilado) 70 ev m/z (int. rel.%): 514(7), 454(19), 394(5), 379(3), 325(1), 322(1), 280(2), 265(4), 251(10), 250(11), 158(32), 139(23), 126(14), 115(11), 43(100).

RMN<sup>1</sup>H (derivado diacetilado), cloroformo deuterado,  $\delta$  en ppm ref. a TMS (multiplicidad, J en Hz, integración): 0.78 (d, J=7.3H); 0.88 (s, 3H); 0.97 (d, J=7.3H); 1.04 (s, 3H); 2.08 y 2.10 (s, 6H); 3.40 (m, 2H); 4.18 (dd, J=9, J=4.5; 1H); 4.60 (m, 1H); 5.14 (dd, J=11, J=4.5; 1H); 5.33 (m, 1H).

## II. Resultados y discusión

El compuesto aislado se encuentra en la planta en un 0.043%; fue eluido con cloroformo: metanol (95:5) y cristalizado de acetona p.f. 204-5°C y  $[\alpha]_{D}^{20}$  -79°.

El espectro infrarrojo presenta bandas de absorción en 3,400 y 1,030 cm<sup>-1</sup>; características de alcoholes y en 960, 915, 895(f) y 860 cm<sup>-1</sup>, típicas de un sistema esteroide. Como la banda de 895 cm<sup>-1</sup> es mucho más fuerte que la de 915 cm<sup>-1</sup> debe ser una sapogenina esteroide 25R (Wall *et al.*, 1952: 1337).

El espectro de masas presenta un ion molecular en m/z 139 (pico base) y 115, característicos de una sapogenina esteroide sin sustituyentes en el anillo F (Budzikiewicz *et al.*, 1962: 1033). Además, aparece un ion fragmento importante en m/z 168 (66%) que sugiere la presencia de un grupo hidroxilo en C-15, lo que se corrobora por la aparición débil de los iones fragmentos en m/z 287, 316 y 301, propias de la ruptura por el anillo E (Dawidar, 1974: 141).

El espectro de RMN<sup>1</sup>H a 90 MHz corrobora la presencia de un doble enlace, ya que aparece en 5.35 ppm un multiplete correspondiente al protón vinílico. Aparece un singlete en 1.04 ppm (3H) para el metilo C-19, característico de un sistema -3 $\beta$  hidroxilado y otro en 0.81 ppm (3H) para el metilo C-18 que, de existir un grupo hidroxilo en C-15, debe estar en posición  $\alpha$ , ya que de lo contrario aparecería esta señal en campos más bajos. Dos dobletes (3H cada uno J=7Hz) en 0.97 y 0.80 ppm, para los metilos C-21 y C-27 respectivamente. Además, aparecen dos grupos de señales en 3.43 y 4.14 ppm de los protones en C-26, C-3, C-16 y C-15. Este espectro corrobora la configuración 25R por encontrarse la señal del metilo C-27 en 0.80 ppm (Tori y Aono, 1964: 136).

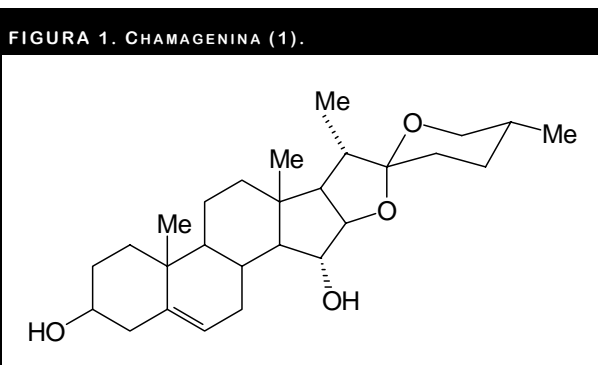
La acetilación de este compuesto con anhídrido acético y piridina a temperatura ambiente produce casi cuantitativamente el diacetato, lo que se demuestra por su espectro

IR, RMN<sup>1</sup>H y de masas. Esto sugiere que el hidroxilo en C-15 se encuentre en una posición no impedida estéricamente, es decir, en posición  $\alpha$ , pues de estar el hidroxilo en posición 15 $\beta$  no puede acetilarse en condiciones suaves por impedirlo por el metilo situado en C-13 (Tschesche *et al.*, 1963: 959).

El espectro de RMN<sup>1</sup>H del derivado diacetilado muestra dos singletes en 2.08 y 2.10 ppm (6H), característicos de los protones de los grupos acetilos. Aparece además un multiplete en 3.40 ppm característico del grupo metileno C-26, un doblete en 4.18 ppm (J=9Hz, J'=4.5 Hz) del protón a en C-16, un multiplete en 4.60 ppm asignable al protón a en C-3 y un doblete en 5.14 ppm (J=11Hz, J'=4.5Hz) característico del protón  $\beta$  en C-15.

Si comparamos el espectro de RMN<sup>13</sup>C del compuesto natural con el de la diosgenina y restamos los corrimientos químicos de la bahamgenina (Coll *et al.*, 1983: 787) e isochiapagenina (Coll *et al.*, 1982: 225), para conocer el efecto

CARBONOS	(1)	CALCULADO	INEPT
1	37.3	37.2	CH <sub>2</sub>
2	31.3	31.6	CH <sub>2</sub>
3	71.6	71.5	CH
4	42.1	42.1	CH <sub>2</sub>
5	140.2	140.8	C
6	121.6	121.3	CH
7	32.3	32.0	CH <sub>2</sub>
8	31.7	31.0	CH
9	49.7	49.6	CH
10	36.5	36.6	C
11	20.7	20.9	CH <sub>2</sub>
12	40.2	39.1	CH <sub>2</sub>
13	40.2	39.7	C
14	60.3	59.8	CH
15	79.5	78.5	CH
16	89.8	89.6	CH
17	59.5	59.0	CH
18	17.4	17.2	CH <sub>3</sub>
19	19.4	19.4	CH <sub>3</sub>
20	41.6	41.6	CH
21	14.4	14.5	CH <sub>3</sub>
22	109.1	109.1	C
23	31.5	31.4	CH <sub>2</sub>
24	28.8	28.8	CH <sub>2</sub>
25	30.2	30.3	CH
26	66.9	66.7	CH <sub>2</sub>
27	17.1	17.1	CH <sub>3</sub>



que produce un sustituyente hidroxílico en C-15 en posición  $\alpha$  (ver tabla 1), encontramos que se corroboran todas las conclusiones anteriores. Las pequeñas diferencias existentes pueden ser atribuibles a efectos del solvente, ya que el espectro de la bahamgenina fue registrado utilizando una mezcla de cloroformo deuterado y metanol deuterado. En el espectro del producto natural se observan corrimientos químicos característicos, debido a la función hidroxílica: efecto  $\alpha$  sobre C-15; efectos  $\beta$  sobre C-14 y C-16; efecto  $\gamma$  sobre C-17 y efecto  $\delta$  sobre C-18, lo cual confirma la posición del segundo grupo hidroxílico en C-15  $\alpha$  (Blunt y Stothers,

1977: 439). Todos los datos anteriores sugieren la estructura (25R)-espirost-en-3 $\beta$ ,15 $\alpha$ -diol; este es un compuesto que por primera vez se reporta y fue denominado Chamagenina. En la figura 1 se describe su estructura.

### III. Equipos utilizados


Para la realización de los espectros de RMN se utilizó un espectrómetro JEOL FX 90Q a 90 MHz para los espectros protonicos y a 22.5 MHz para los de carbono trece.

Un Espectrómetro de Masas de sector magnético JEOL JMS-DX300 fue utilizado para obtener los espectros de masas, con una fuente iónica por impacto electrónico de 70 eV.

Los espectros de infrarrojos fueron realizados en un espectrofotómetro FT-IR de la firma ATI-Matson modelo Génesis.

### Conclusiones

Se encontró una nueva sapogenina esteroideal en el *Solanum chamaecanthum* Griseb que se denominó Chamagenina y cuya estructura es (25R)-espirost-en-3 $\beta$ , 15 $\alpha$ -diol.

La Chamagenina se encuentra en la planta en 0.043%. 

### BIBLIOGRAFÍA

- Blunt, J. W. y Stothers, J. B. (1977). "Carbon-13 NMR Studies. Part 69. Carbon-13 NMR Spectra of Steroids a Survey and Commentary", en *Org. Magn. Resonance*. 9 (8), 439.
- Budzikiewicz, H.; Wilson, J. M. y Djerassi, C. (1962). "Mass Spectrometry and its Application to Structural and Stereochemical Problems. XV. Steroidal Sapogenins", en *Monastb Chem*. 93: 1033.
- Coll, F.; Preiss, A.; Padrón, G.; Basterrechea M. y Adam, G. (1983). "Bahamgenin a Steroidal Sapogenin from *Solanum bahamense*", en *Phytochemistry*. 22 (3): 787.
- Coll, F.; Adam, G.; Padrón, G.; Basterrechea, M. y Vérez, V. (1982). "Diosgenin, Chlorogenin and Isochiapagenin from *Solanum bahamense* Linn", en *Pharmazie*. 37, 225.
- Dawidar, A. M. y Fayed, M. B. E. (1974). "Steroidal Sapogenins XIV. Thin Layer Chromatographic Detection and Estimation of Steroid Sapogenins in Fenugreek", en *J. Pharm. Sci.* 63: 141.
- Tori, K. y Aono, K. (1964). *Ann. Rep. Abionogi Res. Lab.* 14: 136.
- Tschesche, R.; Wulff, G. y Balle, G. (1963). "Saponins of the Spirostanol Series. XIV. Common Occurrence of 25 $\alpha$  and 25 $\beta$ -Sapogenins in the Saponin from *Digitalis purpurea* and *D. Lanata*", en *Tetrahedron*. 18: 959.
- Wall, M. E.; Eddy, R.; McClennan, M. L. y Klump, M. E. (1952). "Detection and Estimation of Steroidal Sapogenins in Plant Tissue", en *Anal. Chem.*, 24, 1337.