

VALEPOTREATOS DE VALERIANA INTERRUPTA

F. Rey, A. Pastor de Abram\*, H. Becker\*\*, and B. Tauscher\*\*\*

Nombre : Valeriana interrupta, var. clatior, valerianacea, raíces, valepotriatos.

---

RESUMEN : Raíces de *V. interrupta* contienen 12% de valepotreatos, fueron aislados Valtrato y dos nuevos compuestos 11-Etoxiviburtinal, 11-Metoxiviburtinal. La estructura química fue caracterizada a partir de los datos RMN y EM.

---

INTRODUCCION

El extracto de raíces de valeriana es usado en la medicina folklórica desde la época de los Incas [1,2]. Tiene efectos sedativos y antiespasmódicos. Las especies de valerianas de los Andes aparentemente contiene alta concentración de

---

\* Pontificia Universidad Católica del Perú - Departamento de Ciencias, Sección Química, Apartado 1761 - Lima/Perú.

\*\* Pharmazeutische Biologie - Universität Heidelberg, Im Neuenheimer Feld 364 - 6900 - Heidelberg - RFA.

\*\*\* Bundesforschungsanstalt fuer Ernährung, Institut fuer Chemie und Biologie Engesserstrasse 20 - 7500 Karlsruhe. RFA.

valepotreatos. En el Perú [3], se conocen cerca de 16 géneros y 400 especies de esta familia; esto nos anima a investigarlas esperando encontrar nuevos compuestos.

En nuestra búsqueda de nuevas sustancias naturales en las plantas valerianáceas del Perú, hemos examinado las raíces de *Valeriana interrupta*, de las cuales se han aislado tres compuestos. Uno de estos compuestos es el valtrato 1, conocido anteriormente, y otros son sustancias nuevas: 11-etoxiviburtinal y 11-metoxiviburtinal.

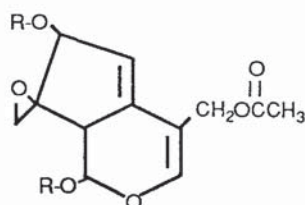
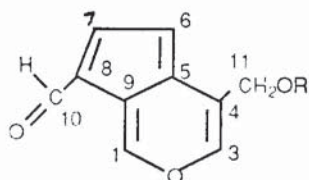


Fig. 1.- Valtrato 1, R=COCH<sub>2</sub>CH (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>

#### DISCUSION DE RESULTADOS

El compuesto 1 fue identificado según los datos espectroscópicos, los cuales estaban de acuerdo con los reportados en la literatura [4,5]. La tabla 1, basada en los datos de <sup>1</sup>H-RMN, para los compuestos 2 y 3 que se comparan al baldrinal 4. La diferencia más saltante se encuentra en el H-11 debido al -C=O que no está presente en 2 ó en 3. Los grupos metilo de 3 y 4 muestran singuletes a 3.45 y 2.10 ppm respectivamente, ya que se encuentran en diferentes ambientes químicos: en 3, un grupo -OCH<sub>3</sub>, y en 4 un grupo -O-COCH<sub>3</sub>; y para el compuesto 2 se observan un triplete y un cuarteto, debidos al sistema A<sub>2</sub>B<sub>3</sub>. El espectro de masas de 2 presenta M<sup>+</sup> a m/z = 204. Las mediciones han mostrado que el fragmento

m/z = 160	es formado a partir de	m/z = 204
m/z = 159	" " " " "	m/z = 203
m/z = 132	" " " " "	m/z = 160
m/z = 131	" " " " "	m/z = 159,132
m/z = 103	" " " " "	m/z = 132, 131, 104



11-Etoxiburtinal **2**      R = CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>  
 11-Metoxiburtinal **3**      R = CH<sub>3</sub>  
 Baldrinal **4**              R = COCH<sub>3</sub>

**Tabla 1:** Desplazamiento <sup>1</sup>H-RMN (ppm) de 11-Etoxiburtinal **2**, 11-Metoxiburtinal **3** y Baldrinal\* **4**.

	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>4</b>
H - 1	9.18	9.18	9.14
H - 3	7.89	7.87	7.86
H - 6	6.60	6.60	6.59 (0.7 Hz) 6.59 (3.0 Hz)
H - 7	7.85	7.85	7.82
H - 10	9.91	9.91	9.91
H - 11	4.67	4.62	5.24
R: metileno	3.62	- - -	- - -
metilo	1.25	3.45	2.1

Solvente CD<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>; para **4**, CDCl<sub>3</sub>; TMS como estándar interno.

\* De los datos bibliográficos [4].

El espectro de masas de **3** presenta M<sup>+</sup> a m/z = 190. Una intensidad menor que 2% se observa para el fragmento con m/z = 176, cuando se compara con la intensidad de 26% [6], para el mismo fragmento de Baldrinal **4**, ya que el último elimina CH<sub>2</sub>=C=O.

#### PARTE EXPERIMENTAL

El espectro UV fue medido en MeOH; el espectro IR como película en ventanas de KCl; el espectro <sup>1</sup>H-RMN fue obtenido a 80 MHz en CDCl<sub>3</sub> y a

300 MHz en  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$ , con TMS como estándar interno; el de  $^{13}\text{C}$ -RMN fue obtenido a 20.1 MHz en  $\text{CDCl}_3$  usando transformada de Fourier, el EM fue realizado a 70 eV.

**MATERIAL VEGETAL:** Raíces de valeriana interrumpida fueron recolectadas en la provincia de Huarochirí (zona de Matucana) al Este de Lima, Perú, a 3,700 m.s.n.m. La planta fue identificada por K. Mejía, Departamento de Botánica, Universidad Nacional Mayor de San Marcos.

**EXTRACCION Y AISLAMIENTO:** 400 g. de raíces de valeriana interrumpida, secas y pulverizadas, fueron extraídas durante una semana con un volumen total de 9 L de  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  a temperatura ambiente. El extracto fue concentrado en vacío para dejar un residuo (48 g) que fue disuelto en etanol 90% (0.5 L). Apareció un precipitado P1 (1.5 g), que contenía valtrato como componente principal. La solución alcohólica fue diluida con 1L de EtOH 90%; se añadió  $\text{Pb}(\text{AcO})_4$ , se filtró y lavó con MeOH 70%. La solución fue extraída con  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  (4L), lavada con  $\text{H}_2\text{O}$ , filtrada y evaporada al vacío, produciendo un aceite amarillo marrón P2 (5.7 g).

*Purificación de P1:* Primero fue purificado por CC sobre sílica-gel 60 eluyendo con n-hexano/etilmetilcetona (80:20), obteniéndose un compuesto bastante puro. Fue purificado por CC en sílica-gel 60 eluyendo con  $\text{CH}_2\text{Cl}_2/\text{Me}_2\text{CO}/\text{EtOAc}$  (100:2:2) y produciendo valtrato 1; CCD en sílica-gel:  $R_f=0.49$  en n-hexano/etilmetilcetona (80:20) y  $R_f=0.79$  en  $\text{CH}_2\text{Cl}_2/\text{Me}_2\text{CO}/\text{EtOAc}$  (100:2:2).

*Purificación de P2:* Fue sometido a CC en sílica-gel 60 y eluido con  $\text{CH}_2\text{Cl}_2/\text{Me}_2\text{CO}/\text{EtOAc}$  (100:2:2), se aisló un compuesto amarillo. Luego fue purificado en CCDP en sílica-gel 60H(0.75 mm) con n-hexano/etilmetilcetona (80:20), y cada placa fue recromatografiada 3 veces. Se observaron tres bandas amarillas en CCD,  $R_f=0.43$ , 0.39 y 0.35; sólo la primera y la última de éstas fueron recolectadas. El compuesto de  $R_f$  más alto fue purificado por CC (flujo 1.35 mL/mm) sobre sílica-gel 60 pre-empacada, medida A (Merck), con hexano/etilmetilcetona (80:20) como eluyente obteniendo un compuesto 2 amarillo bastante puro. El compuesto de menor  $R_f$  fue purificado por CC en RP-8 medida A (Merck) con MeOH/ $\text{H}_2\text{O}$  (80:20) como eluyente (flujo 1.33 mL/min) obteniendo un compuesto 3 amarillo puro.

## BIBLIOGRAFIA

1. H. Valdizán y A. Maldonado (1929) **La Medicina Popular Peruana**. Tomo II, Lima.
2. J. Soukup s.D.B. (1970) **Vocabulario de nombres vulgares de la Flora Peruana**. Colegio Salesiano de Lima, p. 363.
3. J. Francis (1950) **Mc Bride Flora of Peru**. Part II N° 2.
4. P.W. Thies (1968) *Tetrahedron* **24**, 313.
5. S.S. Popov and N.V. Handjieva (1979) *Biomedical Mass Spectrometry* **6**, 124.
6. P.W. Thies, E. Finner and S. David (1981) *Planta Médica* **41**, 15.