

OBTENCIÓN DE MONOGLICOSIDOS DE *AGERATINA VACCINIAEFOLIA* Y DETERMINACIÓN DE SU ESTRUCTURA TRIDIMENSIONAL

RESUMEN

La planta fue recolectada en el páramo Cruz Verde, ubicado sobre la vía que de Bogotá conduce a Choachí. Fue sometida a un proceso de extracción utilizando solventes de polaridad creciente y aislándolas por medio de cromatografía RP-18 y Silica Gel, tanto de columna como de capa fina.

La identificación de las sustancias fue realizada por medio del análisis de espectros de infrarojo, determinación del punto de fusión, actividad óptica, comportamiento ante reactivos químicos y el análisis de espectros unidimensionales de resonancia magnética nuclear tales como: ^1H , ^{13}C , DEPT 45, 90 y 135 y mediante el uso de los espectros bidimensionales COSY, HMQC y HMBC. Se encontró que las sustancias son diterpenos pertenecientes a la familia de los kauranos y se identificaron como (-)-17-(beta-glucopiranosiloxil)-kauran-19-oico-acid y (-)-16-(beta-glucopiranosiloxil)-16-ol-kauran-19-oico-acid

Para la determinación de la configuración tridimensional se obtuvo monocristales utilizando el método de evaporación lenta desde una solución. Los parámetros cristalográficos y las fases del factor de estructura fueron obtenidas directamente de las intensidades del patrón de difracción de rayos X (métodos directos). El refinamiento de los modelos se realizó utilizando el método de mínimos cuadrados.

PALABRAS CLAVES: *Ageratina Vacciniaefolia*, estructura tridimensional, resonancia magnética nuclear, difracción de rayos X.

ABSTRACT

The plant was collected in the Cruz Verde Paramo, located on the route that from Bogota leads to Choachí. It was put under a process of extraction using solvents of increasing polarity and isolating them by RP-18 and Silica Gel chromatography, as much of column as of thin layer. The identification of the substances was made by the analysis of infrared spectra, determination of the melting point, optical activity, chemical reagents and the analysis of 1D nuclear magnetic resonance spectra such as: ^1H , ^{13}C , DEPT 45, 90 and 135 and by the use of bidimensional experiments COSY, HMQC and HMBC. It was found that the substances are diterpenes of the kauranes family and they were identified as (-)-17-(β -glucopyranosyloxy) - kauran-19-oic acid and (-)-16- (β -glucopyranosyloxy)-16-ol-kauran-19-oic acid. For the determination of the three-dimensional configuration, monocrystals were obtained by using the method of slow evaporation from a solution. The crystallographic parameters and the phases of the structure factor were obtained directly from the intensities of the pattern of x-rays diffraction (direct methods). The refinement of the models was made using the method of square minimums.

KEYWORDS: *Ageratina Vacciniaefolia*, three-dimensional structure, nuclear magnetic resonance, x-rays diffraction.

R. A. HUERTAS *
angelicahuertas@gmail.com

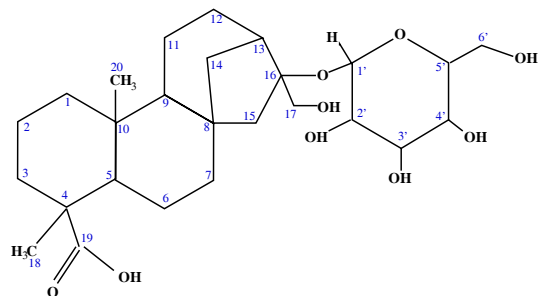
R. D TORRENEGRA**
rtorrene@javeriana.edu.co

O. RODRÍGUEZ,**
C. ROJAS*,
J. A RODRÍGUEZ *.**

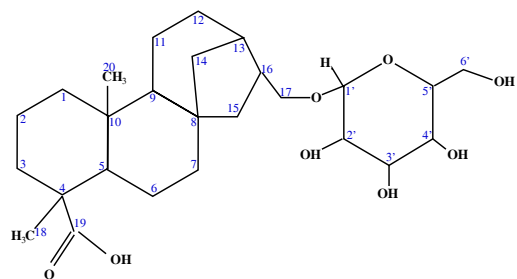
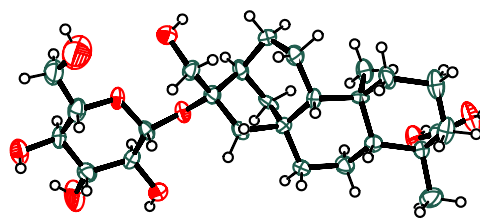
* Grupo de biofísica molecular y física médica, Universidad Javeriana, Bogotá D.C., Colombia.

** Grupo de Investigación Fitoquímica, Universidad Javeriana, GIFUJ, Bogotá D.C., Colombia.

*** Grupo de la materia condensada, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D.C.



(-)-16-(beta-glucopiranosiloxi)-16-ol-kauran-19-oico-acid



(-)-17-(beta-glucopiranosiloxi)-kauran-19-oico-acid

