

Estudio fitoquímico de Siparuna gesnerioides y su actividad antiviral contra Sars-Cov-2

Phytochemical study of *Siparuna gesnerioides* and its antiviral activity against SARS-CoV-

2

Jhon F. Castañeda-Gómez¹; Diégina A. Fernandes²; Nayara S. Ricardo³; Esthella A. S. Silva²; Simony C. Mendonça⁴; Mariana F. Campos⁵; Thamires S. Fonseca³; Diego Allonso⁵; Suzana G. Leitão⁵; Gilda G. Leitão².

¹Grupo químico de Investigación y Desarrollo Ambiental, Programa de Licenciatura en Ciencias Naturales y Educación Ambiental, Universidad Surcolombiana, Neiva, Huila-Colombia. jhon.castaneda@usco.edu.co

²Instituto de Pesquisas de Produtos Naturais, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.

ggleitao@ippn.ufrj.br

³Programa de Pós-graduação em Ciências Farmacêuticas, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro

⁴Faculdade de Farmácia, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro

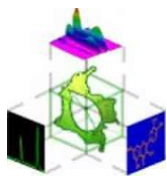
⁵Programa de Biotecnologia Vegetal e Bioprocessos, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro,

sgleitao@gmail.com

Presentación Oral 32

ABSTRACT

Species of the genus *Siparuna* (Siparunaceae) are distributed in Central and South America and are popularly recognized for their anxiolytic, antioxidant, and antiviral properties ^[1,2]. *Siparuna gesnerioides* (Kunth) A. DC. is a species native to Colombia, and its essential oil is rich in sesquiterpenes, although its fixed constituents and biological activities are still poorly studied^[3]. This summary describes the phytochemical work of a leaf collection carried out in the "La Tribuna" nature reserve in the department of Huila (Colombia). Therefore, the material was dried and pulverized. Subsequently, it was extracted with ethanol by exhaustive maceration. The crude oil was partitioned with a successive mixture of hexane-methanol-water, dichloromethane-methanol-water, ethyl acetate-methanol-water, and butanol-methanol-water. The extracts were then evaluated for their potential to inhibit the SARS-CoV-2 RBD:ACE2 interaction using the Lumit® PROMEGA bioluminescence assay (100 µg/mL) and the PL pro and 3CLpro proteases (100 µg/mL). The most active extract was purified by countercurrent chromatography (CCC) using an HTPrep system equipped with a 112 mL column, using a hexane-ethyl acetate-methanol-water solvent system in the ratios 3:7:5:5 and 5:5:5:5 v/v. Then, from two fractionations using the same chromatographic conditions, 75 fractions were obtained in the elution-extrusion mode, which were grouped by



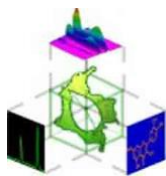
chromatographic similarity (TLC). The most promising fractions were purified using a Sephadex LH-20 column and analyzed by ^1H , ^{13}C , HMBC, and HSQC nuclear magnetic resonance. CCD analysis revealed yellow and orange bands characterized by NP-PEG and Dragendorff reagents, which are characteristic of flavonoids and alkaloids. Fraction XIII was selected for purification, allowing the identification of the flavonoid 3,7-di-O-methyl-kaempferol (kumatakenin). The extract showed a 54% inhibition of the SARS-CoV-2 RBD:ACE2 interaction and a 92% inhibition in the PL pro and 3CLpro assays. The developed methodology has proven efficient for isolating the phenolic compounds and alkaloids present in the SGCHD extract, requiring additional fractionations for the identification and isolation of these metabolites responsible for its antiviral potential.

Key words:

Siparunaceae, *Siparuna gesnerioides*, Countercurrent Chromatography, Nuclear Magnetic Resonance, Antiviral Potential for Covid-19.

RESUMEN

Las especies del género *Siparuna* (Siparunaceae) están distribuidas en América Central y del Sur, y son reconocidas popularmente por sus propiedades ansiolíticas, antioxidantes y antivirales^[1,2]. La planta *Siparuna gesnerioides* (Kunth) A. DC. es una especie originaria de Colombia y su aceite esencial es rico en sesquiterpenos, aunque sus constituyentes fijos y actividades biológicas aún son poco estudiadas^[3]. El presente resumen describe el trabajo fitoquímico de una colecta de hojas realizada en la reserva natural “La Tribuna” del departamento del Huila (Colombia). Por lo tanto, el material se secó y se pulverizó. Posteriormente, se extrajo con etanol mediante maceración exhaustiva. El crudo se particionó con una mezcla sucesiva de hexano-metanol-agua, diclorometano-metanol-agua, acetato de etilo-metanol-agua y butanol-metanol-agua. Después, los extractos se evaluaron a través del potencial para inhibir la interacción RBD:ACE2 del SARS-CoV-2, utilizando el ensayo de bioluminiscencia Lumit® PROMEGA (100 µg/mL) y con las proteasas PL pro y 3CLpro (100 µg/mL). El extracto más activo se purificó mediante cromatografía de contracorriente (CCC), usándose un equipo HTPrep, equipado con una columna de 112mL, utilizando un sistema solvente hexano-acetato de etilo-metanol-agua en las proporciones 5:5:5:5 y 3:7:5:5 v/v. Luego, de dos fraccionamientos utilizando las mismas condiciones cromatográficas, se obtuvieron 75 fracciones de 5 mL en el modo de elución-extrusión, las cuales fueron agrupadas por similitud cromatográfica (TLC). La purificación de las fracciones más prometedoras se realizó utilizando una columna Sephadex LH-20 y se analizaron por resonancia magnética nuclear ^1H , ^{13}C , HMBC y HSQC. En el análisis de los CCDs fue posible observar bandas de color amarillo y naranja a través de reactivos específicos como NP-PEG y Dragendorff, características de flavonoides y alcaloides. La fracción XIII fue seleccionada para ser purificada permitiendo la identificación del flavonoide 3,7-di-O-metil-kaempferol (kumatakenina). El extracto mostró una inhibición del 54% entre la interacción RBD:ACE2 del SARS-CoV-2 y del 92% en la prueba con PL pro y



REVISTA PRODUCTOS NATURALES

ISSN 1916-2413



Vol. 6 Núm. 1 (2025): I Congreso Colombiano de Productos Naturales

Disponible en línea en

<https://www.nozomiscience.org/index.php/rpn/issue/view/587>

doi: <https://doi.org/10.3407/rpn.v6i1po32>



3CLpro. La metodología desarrollada ha demostrado ser eficiente para el aislamiento del compuesto fenólico y sustancias de naturaleza alcaloide presente en el extracto de SGCHD, requiriendo fraccionamientos adicionales para la identificación y aislamiento de estos metabolitos responsables del potencial antiviral (Figura 1).

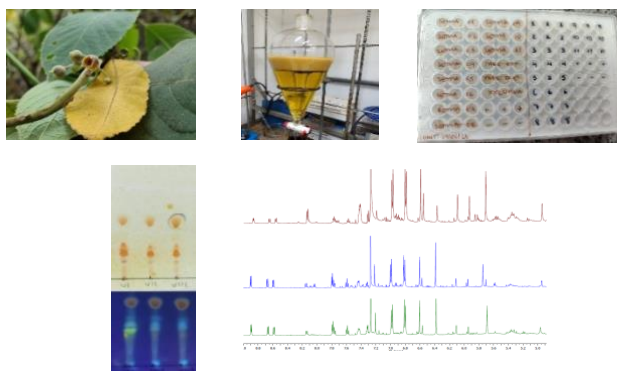


Figura 1. Extracción de flavonoides y alcaloides de *Siparuna gesnerioides* con potencial antiviral SARS-COV-2

Palabras clave:

Siparunaceae, *Siparuna gesnerioides*, Cromatografía Contracorrente, Resonancia Magnética Nuclear, Potencial Antiviral Covid-19.

Agradecimientos/Acknowledgements

Agradecemos a Ecopetrol por el permiso otorgado para la colecta de la especie, a la Universidad Federal do Rio de Janeiro por el uso del equipo para CCC y la evaluación biológica y a FAPERJ, CAPES por la beca otorgada como professor visitante a la UFRJ-Brasil.

Referencias/References

- [1] LEITÃO, G. G., *et al.* (2000). Kaempferol Glycosides from *Siparuna Apiosyce*. *Phytochemistry* **55**(6): 679-682. [DOI]
- [2] LEAL, C. M., *et al.* (2022). Bioassay-Guided Fractionation of *Siparuna Glycyarpa* *n*-Butanol Extract with Inhibitory Activity against Influenza A(H1N1)Pdm09 Virus by Centrifugal Partition Chromatography (CPC). *Molecules* **27**(2). [DOI]
- [3] GONZALEZ, J. E. A., *et al.* (2022). Aislamiento, Caracterización y Evaluación de los Aceites Esenciales de *Siparuna gesnerioides* (Kunth) A. DC., como Agente Antimicrobiano contra *Salmonella* spp. *Revista Productos Naturales*, **5**(2), 179-181. [DOI]