

## Contribution to the Chemical Study of *Rivina humilis*

## Contribuição para o estudo químico de *Rivina humilis*

DOI: 10.34188/bjaerv5n3-004

Recebimento dos originais: 06/05/2022

Aceitação para publicação: 30/06/2022

### Ma. del Rosario Hernández Medel

Doctora en Química por la Universidad Nacional Autónoma de México/Facultad de Química  
Institución: Universidad Veracruzana/Instituto de Ciencias Básicas/Laboratorio de Productos Naturales

Dirección: Dr. Luis Castelazo Ayala s/n, Col. Industrial Ánimas C.P. 91190, Xalapa, Veracruz, México

Correo electrónico: rmedel@uv.mx

### Lilia Mireya Méndez Ventura

Doctora en Neuroetología por la Universidad Veracruzana/Instituto de Neuroetología  
Institución: Universidad Veracruzana/Facultad de Química Farmacéutica Biológica

Dirección: Zona Universitaria C.P. 91000, Xalapa, Veracruz, México

Correo electrónico: limendez@uv.mx

### Abril de los Ángeles Aguilar Tirado

Doctora en Neuroetología por la Universidad Veracruzana/Instituto de Neuroetología  
Institución: Universidad Veracruzana/Facultad de Química Farmacéutica Biológica

Dirección: Zona Universitaria C.P. 91000, Xalapa, Veracruz, México

Correo electrónico: abaguilar@uv.mx

### RESUMEN

*Rivina humilis* es una planta herbácea, relativamente abundante en el estado de Veracruz; se emplea, en Medicina Tradicional, para contrarrestar diversos padecimientos, como la diarrea y la mordedura de serpientes, además, de cuestiones relacionadas con los nervios, "el espanto". De una fracción clorofórmica del extracto metanólico de hoja de esta especie, se aislaron y dilucidaron las estructuras de taraxerol, espinasterol, octacosanol y 4-hidroxicinamato de metilo.

**Palabras clave:** *Rivina humilis*, Phytolaccaceae, taraxerol, espinasterol, octacosanol.

### RESUMEN

*Rivina humilis* é uma planta herbácea, relativamente abundante no estado de Veracruz; é usado, na medicina tradicional, para combater várias doenças, como diarreia e picadas de cobra, bem como problemas relacionados com os nervos, "o espanto". A partir de uma fração de clorofórmio do extrato metanólico da folha desta espécie, as estruturas de taraxerol, espinasterol, octacosanol e metil 4-hidroxicinamato foram isoladas e elucidadas.

**Palavras-chave:** *Rivina humilis*, Phytolaccacea, taraxerol, espinasterol, octacosanol.

## 1 INTRODUCCIÓN

*Rivina humilis* (Phytolaccaceae) es una planta herbácea anual o por lo general perenne, comúnmente sufruticosa de 30-50 cm de alto, pero puede llegar a medir hasta 120 cm. Presenta tallos ramificados, ascendentes, verdosos, a veces con franjas verticales y paralelas entre sí, rojizas a amarillentas, ligeramente estriados, glabros a glabrescentes con pelos simples y cortos. Las hojas son alargadas y puntiagudas, suelen estar ampliamente espaciadas, miden de 4.0-12.0 cm de largo y 1.5-4.0 cm de ancho, ambas superficies son glabras o puberulentas especialmente a lo largo de las venas. Sus inflorescencias son en forma de racimos simples; es una especie característica de la vegetación secundaria derivada del bosque tropical caducifolio y subcaducifolio, así como de algunos encinares y matorrales xerófilos. Florece a lo largo de todo el año, de preferencia entre junio y diciembre. Distribuida desde el sur y suroeste de Estados Unidos hasta Argentina, incluyendo Las Antillas; introducida y naturalizada en el Antiguo Mundo; es utilizada en otros países como ornamental por sus inflorescencias y frutos coloridos. Es una planta de amplia tolerancia ecológica y sin problemas de supervivencia en el presente.<sup>1,2</sup>

*R. humilis* es conocida comúnmente en México, como *chilocuaco*, *coralillo*, *jala tripa*, *bajatripa* o *hierba del susto*, entre otros, es una especie empleada en Medicina Tradicional, principalmente en la curación del “espanto” y en el tratamiento de enfermedades de tipo nervioso, como la ansiedad y la epilepsia, además de afecciones como la diarrea, ictericia, mordedura de serpientes, etc.<sup>3,4</sup>

Pocos estudios han sido realizados a esta especie, entre ellos, se puede mencionar el reporte que señala que posee una ligera actividad bacteriostática contra *Escherichia coli*, *Salmonella typhimurium*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Klebsiella pneumoniae*, *Staphylococcus aureus* y *Enterococcus faecium*;<sup>5</sup> en otro, se refiere a la ausencia de actividad antifúngica del extracto hidroalcohólico de la parte aérea de esta especie contra *Candida albicans*, *Aspergillus fumigatus*, *Histoplasma capsulatum* y *Coccidioides immitis*; así como la carencia de toxicidad del mismo extracto contra larvas de *Artemia salina*.<sup>6</sup> Igualmente, se ha evaluado la toxicidad del jugo del fruto, debido a su potencial uso en la industria alimentaria como fuente de un colorante de la familia de las betalaínas; y, mediante pruebas de toxicidad aguda, subaguda y subcrónica en ratas, se concluyó que la administración del jugo del fruto de *R. humilis* no produce alteraciones a la homeostasia bioquímica, por lo que se considera que su consumo es seguro, sin producir efectos adversos al organismo.<sup>7</sup> A partir del fruto, se aisló y caracterizó una betaxantina denominada humilixantina,<sup>8</sup> y se caracterizaron diez pigmentos tipo betalaína con poder antioxidante mayor al del ácido ascórbico.<sup>9</sup>

Estudios químicos incipientes realizados a esta especie por nuestro grupo de trabajo, dieron como resultado el aislamiento de espinasterol de los extractos de raíz.<sup>10</sup> Continuando con la investigación de los extractos de esta especie, en el presente trabajo se describe el estudio químico de la fracción apolar del extracto metanólico de hoja (EMRhH), que es la parte empleada en Medicina Tradicional en México,<sup>4</sup> con la finalidad de aislar, purificar y dilucidar las estructuras de los metabolitos secundarios contenidos en el EMRhH, que pudieran estar relacionados con la actividad biológica que se le atribuyen a esta especie vegetal.

## 2 MATERIALES Y MÉTODOS

### Obtención y preparación de la muestra

El material vegetal de *R. humilis*, se recolectó en marzo de 2013 en Jalcomulco, Ver., México. Un espécimen se depositó en el herbario del Centro de Investigaciones Biológicas de la Universidad Veracruzana, con el número de folio 14663, para su autenticación. El material vegetal fue separado en raíz, tallo y hoja, secándose cada una de éstas por separado.

### Purificación de disolventes

Los disolventes empleados, hexano (Hx), cloroformo ( $\text{CHCl}_3$ ), acetato de etilo (AE) y metanol ( $\text{CH}_3\text{OH}$ ), se purificaron por destilación con columnas de rectificación.

### Obtención de los extractos

La hoja, seca y molida (452 g) se extrajo, por maceración con metanol hasta agotamiento, obteniéndose el extracto metanólico (153 g, EMRhH), por filtración del material vegetal y, posterior recuperación del disolvente.

La fracción apolar (FAEMRhH, 10.3 g) se obtuvo mediante lavados sucesivos con  $\text{CHCl}_3$  del EMRhH (15 g EMRhH) y concentración del filtrado clorofórmico.

### Cromatografía en columna

Para la separación y purificación de los metabolitos presentes en la fracción apolar (FAEMRhH) se utilizó la cromatografía en columna abierta (cc), usando gel de sílice 60 Merck (0.063-0.200 mm) y columnas de vidrio de diferentes diámetros dependiendo de la cantidad de muestra por separar/purificar.

### **Cromatografía en capa delgada**

Para el monitoreo de las fracciones y/o mezclas de compuestos obtenidos mediante la cc, se utilizó la cromatografía en capa delgada (ccd), empleando cromatofolios Merck de gel de sílice 60 F<sub>254</sub> y diferentes mezclas de disolventes como eluyentes. Los agentes cromogénicos que se emplearon fueron: luz ultravioleta de onda larga (365 nm) y de onda corta (254 nm), así como CoCl<sub>2</sub> al 2 % en H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> al 10 %.

### **Elucidación estructural por RMN**

Los espectros de Resonancia Magnética Nuclear de protón (RMN-<sup>1</sup>H) y de carbono-13 (RMN-<sup>13</sup>C), así como los bidimensionales (HSQC, COSY y HMBC), se realizaron en la Unidad SARA de la UV, en un espectrómetro Agilent Technologies, Modelo DD2 de 500 y 125 MHz, respectivamente, empleando CDCl<sub>3</sub> como disolvente y, como referencia interna, TMS.

Los puntos de fusión (pf) se determinaron en un aparato Fisher-Johns y no están corregidos.

### **Purificación de la FAEMRhH**

La separación de la fracción FAEMRhH se llevó a cabo mediante cc, utilizando gel de sílice 60 y como eluyentes los disolventes y mezclas de los mismos en orden de polaridad creciente de Hx y AE, y, finalmente, CH<sub>3</sub>OH.

Las fracciones obtenidas fueron comparadas, y en su caso reunidas, de acuerdo con las observaciones en ccd. De esta manera se obtuvieron 50 fracciones de 250 mL cada una, las cuales se reagruparon en 6 concentrados: 1-10, 11- 18, 19-27, 28-30, 31-39 y 40-50.

## **3 RESULTADOS Y DISCUSIÓN**

La fracción soluble en CHCl<sub>3</sub> del EMRhH (FAEMRhH) se sometió a una separación por cc utilizando Hx y mezclas de Hx y AE, aumentando gradualmente la polaridad. De las fracciones eluidas con Hx-AE 95:05 v/v, concentrado 11-18, se obtuvo un sólido amorfo que reveló de color rosa pálido en  $r_f = 0.47$  en Hx-AE 8:2 v/v. El espectro de RMN-<sup>1</sup>H en CDCl<sub>3</sub> mostró señales características de un triterpeno, como las doble de dobles en  $\delta$  3.20 y 5.54 para el protón de la posición 3 y el vinílico en la posición 15, respectivamente, además de la presencia de un alcohol de cadena larga por la señal triple en 3.63 ppm y la simple aguda en 1.25 ppm, así como las señales simples para los metilos en  $\delta$  0.98, 0.80, 0.93, 0.91, 1.09, 0.82, 0.95 y 0.91. El espectro de RMN-<sup>13</sup>C corroboró la presencia de los carbonos vinílicos en 157.95 y 116.58 ppm para las posiciones C14 y C15, respectivamente, del triterpeno y, al mismo tiempo, que se trataba de una mezcla. Los datos espectrales de esta mezcla concuerdan con los reportados para el taraxerol<sup>11</sup> y para el

octacosanol.<sup>12,13</sup> En las Tablas 1 y 2 se presentan los desplazamientos de hidrógenos y carbonos de estas moléculas.

En las fracciones eluidas con Hx-AE 90:10 v/v, concentrado 19-27, se observó un sólido, que al recristalizar de Hx-CHCl<sub>3</sub>, formó agujas finas de color blanco con punto de fusión de 158-160°C. El espectro de RMN-<sup>1</sup>H mostró las señales características de esteroides entre  $\delta$  2.1 y 0.5, destacando señales simples en  $\delta$  0.5 y 0.8, además de dos señales dobles en  $\delta$  0.8 y 1.0, y dos vinílicas, doble de dobles, en  $\delta$  5.1 y 5.0. La comparación de estos datos espectrales con los de la literatura,<sup>10,14-16</sup> además, de una ccd comparativa con una muestra auténtica de espinasterol demostró que se trataba del mismo compuesto (Ver Tabla 1).

De las fracciones eluidas con Hx-AE 80:20 v/v, concentrado 28-30, se logró purificar un sólido de color crema, en forma de prismas, con un punto de fusión de 138-140°C. El espectro de RMN-<sup>1</sup>H, en CDCl<sub>3</sub>, mostró la presencia de dos protones vinílicos, dos señales doble de dobles, en 7.64 y 6.30 ppm con una constante de acoplamiento de 15.9 Hz, además de un anillo aromático disustituido en *para* por las constantes de acoplamiento de los protones aromáticos (8.72 Hz), además de un metoxilo en 3.79 ppm. El espectro de RMN-<sup>13</sup>C, reveló un carbonilo de éster, en 167.98 ppm, los carbonos vinílicos en 144.64 y 115.16 ppm y los aromáticos, igualmente, corroboró la presencia del metoxilo en 51.65 ppm. La identificación de este metabolito se realizó por la comparación de estos datos espectrales con los del 4-hidroxicinamato de metilo.<sup>17,18</sup> Ver Tabla 3.

En relación a la bioactividad que pueden presentar los metabolitos aislado en la presente investigación, se puede mencionar que, el taraxerol ha mostrado actividad antiinflamatoria,<sup>19</sup> inhibición de la actividad de la acetilcolinesterasa (AChE) en animales indicando que este metabolito tiene una actividad antiamnésica que puede tener valor terapéutico significativo para aliviar ciertas alteraciones de la memoria observadas en la enfermedad de Alzheimer.<sup>20,21</sup> En cuanto al espinasterol, se puede mencionar que posee efectos farmacológicos benéficos, pues existen en la literatura reportes como antiinflamatorio, antiulceroso, antihiperalgésico, anticonvulsivo y antioxidante,<sup>22-26</sup> además, se descubrió que se puede usar como un nuevo antagonista selectivo del receptor transitorio potencial vaniloide 1 (TRPV1) para el tratamiento de trastornos mentales.<sup>27,28</sup> En cuanto al octacosanol, investigaciones han demostrado que posee propiedades reductoras del colesterol, antiagregantes, citoprotectoras, ergogénicas, neurológicas, antioxidantes y protectoras contra el parkinsonismo,<sup>29-31</sup> incluso existen suplementos dietéticos que lo contienen ya disponibles en el mercado, sobre todo estadounidense.<sup>32</sup> Por otro lado, García Cordero y col.,<sup>33</sup> opinan que los hidroxicinamatos presentan un complejo y multifactorial efecto con capacidad de mejorar las distintas disfunciones metabólicas asociadas a la obesidad, como pueden ser dislipidemia, resistencia a la insulina, así como inflamación; sin embargo, y debido a que casi todos los estudios

se han realizado con animales, proponen que es necesario aportar evidencias científicas que provengan de estudios en seres humanos, para así evidenciar su potencial como herramienta nutricional en el manejo de enfermedades cardiovasculares, diabetes tipo 2, obesidad o el síndrome metabólico.

En las Tablas 1, 2 y 3, se muestran todos los datos espectrales de los compuestos aislados, ello de acuerdo con la literatura consultada.<sup>11-18</sup>

En la Figura 1 se muestran las estructuras de los metabolitos aislados en la presente investigación.

#### 4 CONCLUSIONES

De la fracción soluble en  $\text{CHCl}_3$  del extracto metanólico de hoja de *Rivina humilis* (FAEMRhH) se aislaron una mezcla de octacosanol y taraxerol, espinasterol y 4-hidroxicinamato de metilo.

La dilucidación estructural de estos metabolitos se realizó por RMN, en algunos casos con la comparación del punto de fusión y así como por una ccd con una muestra auténtica.

Los metabolitos secundarios aislados en esta investigación, taraxerol, octacosanol, espinasterol y 4-hidroxicinamato de metilo, señalan la posibilidad de aplicación farmacológica que *R. humilis* posee, específicamente la hoja de esta especie, por lo cual la investigación química de los extractos continúa.

## REFERENCIAS

1. Sandoval-Ortega MH, Siqueiros-Delgado ME. (2018). Las familias Aizoaceae, Molluginaceae y Phytolaccaceae (Caryophyllales) en el estado de Aguascalientes, México. *Polibotánica*, 46: 27-47.
2. Rzedowski J, Calderón G. (2000). Phytolaccaceae. *Flora del bajío y de regiones adyacentes*, 91: 1-32.
3. Martínez-García, J. (1984). Phytolaccaceae. *Flora de Veracruz*, 36: 29-34.
4. Biblioteca Digital de Medicina Tradicional Mexicana (BDMTM): <http://www.medicinatradicionalmexicana.unam.mx/index.php>. Consultado el 11 de mayo de 2022.
5. Salvat A, Antonnacci L, Fortunato RH, Suarez EY, Godoy HM. (2001). Screening of some plants from Northern Argentina for their antimicrobial activity. *Letters in Applied Microbiology*, 32: 293-297.
6. Alanís-Garza B A, González-González G M, Salazar-Aranda R, Waksman de Torres N, Rivas-Galindo VM. (2007). Screening of antifungal activity of plants from the northeast of Mexico. *Journal of Ethnopharmacology*, 114: 468-471.
7. Khan MI, Denny Joseph KM, Muralidhara, Ramesh HP, Giridhar P, Ravishankar GA. (2011). Acute, subacute and subchronic safety assessment of betalains rich *Rivina humilis* L. berry juice in rats. *Food and Chemical Toxicology*, 40: 3154-3157.
8. Strack D, Schmitt D, Reznik H, Boland W, Grotjahn L, Wray V. (1987) Humilixanthin a new taxanthin from *Rivina humilis*. *Phytochemistry*, 26: 2285- 2287.
9. Khan MI, Harsha P, Giridhar P, Ravishankar GA. Pigment identification, nutritional composition, bioactivity, and in vitro cancer cell cytotoxicity of *Rivina humilis* L. berries, potential source of betalains. (2012). *Journal of Food Science and Technology*, 47: 315-23.
10. González-Periañez S. (2016). Contribución al estudio químico del extracto etanólico de la raíz de *Rivina humilis*. Tesis de Licenciatura. Facultad de Química Farmacéutica Biológica, Universidad Veracruzana, Xalapa, Veracruz, México.
11. Oladoye SO, Ayodele ET, Abdul-Hammed M, Idowu OT. (2015). Characterisation and Identification of Taraxerol and Taraxer-14-en-3-one from *Jatropha tanjorensis* (Ellis and Saroja) Leaves. *Pakistan Journal of Scientific and Industrial Research. Series A: Physical Sciences*, 58(1): 46-50.
12. Kunkuma VL, Kaki SS, Rao BVSK, Prasad RBN, Prabhavathi Devi BLA. (2013). A simple and facile method for the synthesis of 1-octacosanol. *European Journal of Lipid Science and Technology*, 115: 921-927.
13. García-Díaz J, Escalona-Arranz J, do Carvalho M, Rojas-Vargas J, Machado-García R, Vega-Acosta J. (2015). Aislamiento y caracterización de metabolitos de hojas de *Croton linearis* Jacq. *Revista Cubana de Química*, 27(3): 289-301.
14. Akihisa T, Thakur S, Rosenstein U, Matsumoto T. (1986). Sterols of Cucurbitaceae: The Configurations at C-24 of 24-AikyI- $\Delta^5$ -,  $\Delta^7$  and  $\Delta^8$ -Sterols. *Lipids*, 21(1): 39-47.
15. Badreddine A, Mostafa K, Zarrouk A, Nury T, Kharrassi Y, Nasser B, Cherkaoui C, Lizard G, Samadi M. (2015). An expeditious synthesis of spinasterol and schottenol, two phytosterols present

in argan oil and in cactus pear seed oil, and evaluation of their biological activities on cells of the central nervous system. *Steroids*, 99(part B): 119-124.

16. Rodriguez JB, Gros EG, Bertoni MH, Cattaneo P. (1996). The Sterols of *Cucurbita moschata* ("calabacita") Seed Oil. *Lipids*, 31(11): 1205-1208.

17. Mahmood U, Kaul VK, Acharya R, Jirovetz L. (2003). *p*-coumaric acid esters from *Tanacetum longifolium*. *Phytochemistry*, 64: 851-853.

18. Xiong Y, Deng K-Z, Guo Y-Q, Gao W-Y, Zhang T. (2009). New Chemical Constituents from the Rhizomes of *Sparganium stoloniferum*. *Archives of Pharmacal Research*, 32(5): 717-720.

19. Khanra R, Dewanjee S, Dua TK, Bhattacharjee N. (2017). Taraxerol, a pentacyclic triterpene from *Abroma augusta* leaf, attenuates acute inflammation via inhibition of NF- $\kappa$ B signaling. *Biomedicine & Pharmacotherapy*, 88: 918-923.

20. Berté TE, Dalmagro AP, Zimath PL, Gonçalves AE, Meyre-Silva C, Bürger C, Weber CJ, dos Santos DA, Cechinel-Filho V, de Souza MM. (2018). Taraxerol as a possible therapeutic agent on memory impairments and Alzheimer's disease: Effects against scopolamine and streptozotocin-induced cognitive dysfunctions. *Steroids*, 132: 5-11.

21. Mus AS, Goh LPW, Marbawi H, Gansau JA. (2022). The Biosynthesis and Medicinal Properties of Taraxerol. *Biomedicines*, 10: 807. <https://doi.org/10.3390/biomedicines10040807>

22. Coballase-Urrutia E, Pedraza-Chaverri J, Camacho-Carranza R, Cárdenas-Rodríguez N, Huerta-Gertrudis B, Medina-Campos ON, Mendoza-Cruz M, Delgado-Lamas G, Espinosa-Aguirre J. (2010). Antioxidant activity of *Heterotheca inuloides* extracts and of some of its metabolites. *Toxicology*, 276: 41-8.

23. Borges F, Silva M, Córdova M, Schambach T, Pizzolatti M, Santos A. (2014). Anti-inflammatory action of hydroalcoholic extract, dichloromethane fraction and steroid  $\alpha$ -spinasterol from *Polygala sabulosa* in LPS-induced peritonitis in mice. *Journal of Ethnopharmacology*, 151: 144-50.

24. Klein LC, Gandolfi RB, Santin JR, Lemos M, Cechinel-Filho V, de Andrade SF. (2010). Antiulcerogenic activity of extract, fractions, and some compounds obtained from *Polygala cyparissias* St. Hillaire & Moquin (Polygalaceae). *Naunyn-Schmiedeberg's Archives of Pharmacology*, 381:121-6.

25. Klein LC, Meira NA, Bresolin TM, Cechinel-Filho V, Quintao NL. (2012). Antihyperalgesic activity of the methanol extract and some constituents obtained from *Polygala cyparissias* (Polygalaceae). *Basic Clinical Pharmacology and Toxicology*, 111(3):145-53.

26. Socala K, Nieoczym D, Pieróg M, Wláz P. (2015).  $\alpha$ -Spinasterol, a TRPV1 receptor antagonist, elevates the seizure threshold in three acute seizure tests in mice. *Journal of Neural Transmission*, 122:1239-47.

27. Trevisan G, Rossato MF, Walker CI, Klafke JZ, Rosa F, Oliveira SM, Tonello R, Guerra GP, Boligon AA, Zanon RB, Athayde ML, Ferreira J. (2012). Identification of the plant steroid  $\alpha$ -spinasterol as a novel transient receptor potential vanilloid 1 antagonist with antinociceptive properties. *Journal of Pharmacology and Experimental Therapeutics*, 343(2):258-69.

28. Socala K, Wláz P. (2016). Evaluation of the antidepressant- and anxiolytic-like activity of  $\alpha$ -spinasterol, a plant derivative with TRPV1 antagonistic effects, in mice. *Behavioural Brain Research*, 33: 19-25.

29. Taylor JC, Rapport L, Lockwood GB. (2003). Octacosanol in human health. *Nutrition*, 19: 192-195.

30. Guo T, Lin Q, Li X, Nie Y, Wang L, Shi L, Xu W, Hu T, Guo T, Luo F. (2017). Octacosanol Attenuates Inflammation in Both RAW 264.7 Macrophages and a Mouse Model of Colitis. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 65(18): 3647–3658.
31. Wang T, Liu Y, Yang N, Ji Ch, Chan P, Zuo P. (2010). Anti-parkinsonian effects of octacosanol in 1-methyl-4-phenyl-1,2,3,6 tetrahydropyridine-treated mice. *Neural Regeneration Research*, 7(14):1080-1087.
32. Irmak S, Dunford NT, Milligan J. (2006). Policosanol contents of bees wax, sugar cane and wheat extracts. *Food Chemistry*, 95: 312–318.
33. García Cordero J, Sarria Ruiz B, González Rámila S, Bravo Clemente L, Mateos Briz R. (2020). Eficacia de los hidroxicinamatos y los beta-glucanos como herramientas dietéticas frente a la obesidad y sus disfunciones asociadas y su aplicación como nutracéutico. *Nutrición Hospitalaria*, 37(5):1061-1071.

Tabla 1. Datos espectrales para Taraxerol y Espinasterol.

	Taraxerol			Espinasterol		
	RMN- <sup>13</sup> C	DEPT	RMN- <sup>1</sup> H	RMN- <sup>13</sup> C	DEPT	RMN- <sup>1</sup> H
	δ, ppm, (J, Hz)			δ, ppm, (J, Hz)		
1	37.69	CH <sub>2</sub>	1.91 dd, 1.61 m	37.13	CH <sub>2</sub>	1.83-1.10 m
2	27.13	CH <sub>2</sub>	1.60 m	31.43	CH <sub>2</sub>	1.39-1.81 m
3	78.91	CH	3.18 dd (4.4, 11.1)	70.95	CH	3.60 m
4	38.96	C		37.92	CH <sub>2</sub>	1.29-1.73 m
5	55.51	CH	0.79 dd (2.38, 12.18)	40.16	CH	1.40 m
6	18.77	CH <sub>2</sub>	1.62 m, 1.45 m	29.54	CH <sub>2</sub>	1.76 m
7	35.10	CH <sub>2</sub>	1.01 m, 1.36 m	117.39	CH	5.16 m
8	38.74	C		139.48	C	-
9	48.73	CH	0.95 m	49.37	CH	1.65 m
10	35.76	C		34.13	C	-
11	17.48	CH <sub>2</sub>	1.63 m, 1.45 m	21.53	CH <sub>2</sub>	1.48-1.58 m
12	37.72	CH <sub>2</sub>	0.95 m	39.45	CH <sub>2</sub>	1.24-2.01
13	37.54	C		43.25	C	-
14	157.95	C		55.05	CH	1.83 m
15	116.58	CH	5.54 dd (3.24, 8.18)	23.00	CH <sub>2</sub>	1.40-1.50 m
16	36.65	CH <sub>2</sub>	1.31 m, 0.96 m	28.45	CH <sub>2</sub>	1.29 m
17	37.98	C		55.85	CH	1.27 m
18	49.26	CH	1.41 m	11.99	CH <sub>3</sub>	0.55 s
19	41.30	CH <sub>2</sub>	2.03 dt (3.32, 12.75), 1.35 m	12.96	CH <sub>3</sub>	0.80 s
20	28.78	C		40.72	CH	2.04 m
21	33.68	CH <sub>2</sub>	1.61 m	21.35	CH <sub>3</sub>	1.03 d (6.6)
22	33.07	CH <sub>2</sub>	1.55 m, 1.35 m	138.09	CH	5.16 dd (8.9, 15.1)
23	27.97	CH <sub>3</sub>	0.98 s	129.39	CH	5.03 dd (8.9, 15.1)
24	15.42	CH <sub>3</sub>	0.80 s	51.18	CH	1.53 m
25	15.40	CH <sub>3</sub>	0.93 s	31.79	CH	1.53 m
26	29.89	CH <sub>3</sub>	0.91 s	18.91	CH <sub>3</sub>	0.80 d (6.4)
27	25.88	CH <sub>3</sub>	1.09 s	21.06	CH <sub>3</sub>	0.85 d (6.4)
28	29.80	CH <sub>3</sub>	0.82 s	25.31	CH <sub>2</sub>	1.17-1.42 m
29	33.32	CH <sub>3</sub>	0.95 s	12.15	CH <sub>3</sub>	0.81 t (7.3)
30	21.29	CH <sub>3</sub>	0.91 s			

Tabla 2. Datos espectrales para Octacosanol (C<sub>28</sub>H<sub>58</sub>O)

Posición	DEPT	RMN- <sup>1</sup> H (δ, ppm)	RMN- <sup>13</sup> C (δ, ppm)
1	CH <sub>2</sub>	3.64 t (J= 6.6 Hz)	63.09
2	CH <sub>2</sub>	1.57 m	32.82
3	CH <sub>2</sub>	1.34 m	25.72
4-25	CH <sub>2</sub>	1.34-1.23 m	29.34-29.68
26	CH <sub>2</sub>	1.28 m	31.91
27	CH <sub>2</sub>	1.26 m	22.67
28	CH <sub>3</sub>	0.88 t (J= 6.9 Hz)	14.08

Tabla 3. Datos espectrales para 4-hidroxicinamato de metilo

	$\delta^{13}\text{C}$	$\delta^1\text{H}$ (Hz)	$^1\text{H}-^1\text{H}$	HMBC
1	127.17			6.85, 6.30, 7.64
2/6	129.95	7.43 d (8.72)	7.64, 6.85	7.63, 7.43
3/5	115.85	6.85 d (8.72)	7.43, 5.83	6.85, 7.43
4	157.72			7.43, 6.85
1'	144.64	7.64 d (15.94)	6.30, 6.85, 7.43	7.43
2'	115.16	6.30 d (15.95)	7.64	7.64, 6.30
3'	167.98			7.64, 6.30, 3.79
4'	51.65	3.79 s		3.79
		5.83 br (OH)	6.85	

Figura 1. Estructuras de los metabolitos aislados.

