

UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR  
FACULTAD DE QUIMICA Y FARMACIA



INTRODUCCION DE INFORMACION ESTRUCTURAL Y  
ESPECTROSCOPICA (RMN  $^{13}\text{C}$ ) DE METABOLITOS AISLADOS DE FLORA  
SALVADOREÑA EN LA BASE DE DATOS NAPROC-13

TRABAJO DE GRADO EN MODALIDAD DE TRABAJO DE INVESTIGACION

PRESENTADO POR:  
JOSUE ISAAC JIMENEZ PINEDA

PARA OPTAR EL GRADO DE:  
LICENCIADO EN QUIMICA Y FARMACIA

JUNIO 2022  
SAN SALVADOR, EL SALVADOR, CENTRO AMERICA

**UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR**

**RECTOR**

MAESTRO. ROGER ARMANDO ARIAS ALVARADO

**SECRETARIO GENERAL**

MAESTRO. FRANCISCO ANTONIO ALARCON SANDOVAL

**FACULTAD DE QUIMICA Y FARMACIA**

**DECANA**

LICDA. REINA MARIBEL GALDAMEZ

**SECRETARIA**

LICDA. EUGENIA SORTO LEMUS

## **DIRECCION DE PROCESOS DE GRADO**

### **DIRECTORA GENERAL**

MSc. Cecilia Haydeé Gallardo De Velásquez

### **TRIBUNAL EVALUADOR**

### **ASESORES DE AREA EN APROVECHAMIENTO DE RECURSOS NATURALES**

Dr. David Francisco Torres Romero

Maestra. Ana Miriam Santamaria De Campos

### **DOCENTE ASESORES**

Dr. Marvin José Núñez Rivas

MSc. Morena Lizette Martínez De Díaz

Dr. José Luis López Pérez

## **AGRADECIMIENTOS**

Son muchas las personas que han contribuido al proceso y culminación de este trabajo de grado. En primer lugar, quiero agradecer al Dr. Marvin José Núñez Rivas asesor y mi maestro en la Universidad: él fue el primero que creyó en este proyecto, me apoyó de manera personal e institucional y me alentó para que culminara esta investigación. De igual forma a Msc. Morena Lizette Martínez de Díaz quien con su conocimiento, guía, apoyo e ideas me permitió aprender mucho más que lo estudiado en el proyecto y al Dr. José Luis López Pérez por haberme brindado la oportunidad de recurrir a su capacidad y conocimiento científico, así como también haber tenido la paciencia para guiarme durante el desarrollo de esta investigación.

A la Facultad de Química y Farmacia de la Universidad de El Salvador, gracias por haberme permitido formarme en ella, gracias a todos los maestros que fueron partícipes en mi crecimiento personal y profesional, ya sea de manera directa o indirecta, ya que fueron ustedes los responsables de realizar su pequeño aporte que el día de hoy se verá reflejado en la culminación de mi paso por la universidad. También a mis compañeros y amigos de la universidad ya que gracias al compañerismo, amistad y apoyo han aportado en un alto porcentaje a mi voluntad de seguir adelante en mi carrera profesional.

Y para finalizar, agradezco también a mi madre por ser ese apoyo incondicional y por brindarme tan valiosos consejos; gracias por su confianza.

## **DEDICATORIA**

Dedico este trabajo de grado a mi madre, pues sin ella no lo habría logrado. Por formarme con buenos sentimientos, hábitos y valores, lo cual me ha ayudado a seguir adelante en los momentos más difíciles. Todo el esfuerzo lo hice por ella, fue un arduo trabajo, pero hoy puedes apreciar los frutos. Espero de ahora en adelante poder retribuir no solo tu amor sino también todo lo que has dado por mí, ser un respaldo para ti y hacerte sentir orgullosa en cada paso que dé.

## INDICE GENERAL

	Pág. N°
RESUMEN	
CAPITULO I	
I. INTRODUCCION	xvi
CAPITULO II	
II. OBJETIVOS	
CAPITULO III	20
III. MARCO TEORICO	21
3.1. BASE DE DATOS NAPROC-13	21
3.2. ESTRUCTURA DE BASE DE DATOS	22
3.2.1. Página de inicio	22
3.2.2. Interfaz de búsquedas	25
3.3. EDITOR DE MOLÉCULAS JME-X	36
3.3.1. Código SMILES	37
3.3.2. Código JME	38
3.4. ESTRUCTURA DE EDITOR DE MOLÉCULAS JME-X	40
3.4.1. Página de inicio	40
3.5. PLANTILLA EXCEL	45
CAPITULO IV	48
IV. DISEÑO METODOLÓGICO	49
4.1. TIPO DE ESTUDIO EXPERIMENTAL	49
4.2. INVESTIGACIÓN BIBLIOGRÁFICA	49
4.2.1. Búsqueda de publicaciones científicas con datos espectroscópicos de RMN <sup>13</sup> C de PN salvadoreños	49
4.3. INVESTIGACIÓN DE CAMPO	50
4.3.1. Extracción de los datos RMN <sup>13</sup> C de las publicaciones científicas	51
4.4. PARTE EXPERIMENTAL	53

4.4.1. Generar estructuras electrónicas de los productos naturales asociadas a los datos de desplazamiento químico	53
4.4.2. Completar plantillas Excel	58
4.4.3. Importación y verificación de la información estructural, bibliográfica y espectroscópica en NAPROC-13	59
CAPITULO V	61
V. RESULTADOS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS	62
5.1. PUBLICACIONES CIENTÍFICAS ENCONTRADAS	62
5.1.1. Palabras claves	62
5.1.2. Criterios de inclusión y exclusión	63
5.2. EXTRACCIÓN DE DATOS DE ARTÍCULOS SELECCIONADOS: CREACIÓN DE FICHAS SISTEMÁTICAS	64
5.2.1. Artículo seleccionado, familia: Lamiaceae	65
5.2.2. Artículo seleccionado, familia: Solanaceae	65
5.2.3. Artículos seleccionados, familia: Asteraceae	66
5.2.4. Artículo seleccionado, familia: Piperaceae	66
5.2.5. Artículos seleccionados, familia: Celastraceae	66
5.3. ESTADÍSTICA DE ARTÍCULOS SELECCIONADOS	69
5.3.1. Año de publicación	69
5.3.2. Familia botánica de las especies vegetales	71
5.3.3. Especies vegetales estudiadas	72
5.4. PROCESAMIENTO DE ESTRUCTURAS: CREACIÓN DE CÓDIGOS SMILES Y JME	73
5.4.1. Estructuras generadas familia: Lamiaceae	73
5.4.2. Estructuras generadas familia: Asteraceae	75
5.4.3. Estructuras generadas familia: Piperaceae	77
5.4.4. Estructuras generadas familia: Solanaceae	78
5.4.5. Estructuras generadas familia: Celastraceae	80
5.5. ESTADÍSTICA DE ESTRUCTURAS INTRODUCIDAS	89

5.5.1. Familias de compuestos	89
5.5.2. Grupos de compuestos	90
5.5.3. Tipos de compuestos	91
5.5.4. Aportes novedosos a la base de datos	93
5.6. ADICIONES O CAMBIOS DE DESPLAZAMIENTOS QUÍMICOS	94
CAPITULO VI	99
VI. CONCLUSIONES	100
CAPITULO VI.	102
VII. RECOMENDACIONES	103
BIBLIOGRAFÍA	
GLOSARIO	
ANEXOS	

## INDICE DE FIGURAS

Figura N°		Pág. N°
1	Página de inicio NAPROC-13.	22
2	Interfaz de registro de NAPROC-13.	23
3	Interfaz de inicio de sesión de NAPROC-13.	24
4	Formulario de búsqueda por nombre.	26
5	Formulario de búsqueda por subestructura.	28
6	Formulario de búsqueda por desplazamiento.	29
7	Formulario de búsqueda por tipos de carbono.	31
8	Resultado de búsqueda con criterio introducido por autor: Núñez.	32
9	Propiedades químicas del compuesto 11a-hydroxy-epi- betulin.	33
10	Propiedades espectrales del compuesto 11a-hydroxy-epi- betulin.	34
11	Interfaz historial de búsqueda de la sesión actual.	35
12	Página de inicio del editor de moléculas JME-X.	40
13	Applet JME del editor de moléculas JME-X.	41
14	Búsqueda de esqueletos por nombre.	44
15	Formato de plantilla Excel vacía.	44
16	Artículo clave: ph84_116, alojado en ScienceDirect.	51
17	Procesamiento del compuesto triterpénico 7.	54
18	Estructuras de esqueletos disponibles para triterpenos de la serie del friedelano.	55
19	Esqueleto epoxy-3-24-friedelanes.	56
20	Plantilla Excel completa para el compuesto triterpénico 7	60
21	Número de palabras claves obtenidas en los artículos científicos	63

22	Diagrama del proceso de inclusión y exclusión.	64
23	Distribución de artículos según año de publicación.	70
24	Distribución de artículos según familia botánica.	71
25	Distribución de especies vegetales por número de artículos.	72
26	Captura NAPROC-13: compuesto 1, clave z06_165_1.	74
27	Captura NAPROC-13: compuesto 2, clave z06_165_2.	75
28	Captura NAPROC-13: compuesto 2, clave ph04_3107_2.	76
29	Captura NAPROC-13: compuesto 1, clave ph157_145_1.	77
30	Captura NAPROC-13: compuesto 4, clave np22_259_4.	78
31	Captura NAPROC-13: compuesto 1, clave np21_2717_1.	78
32	Captura NAPROC-13: compuesto 1, clave ph84_116_1.	81
33	Captura NAPROC-13: compuesto 1, clave np15_1045_1.	82
34	Captura NAPROC-13: compuesto 1, clave ph17_142_1.	83
35	Captura NAPROC-13: compuesto 2, clave thl04_7367_2.	84
36	Captura NAPROC-13: compuesto 3, clave ph11_385_3.	85
37	Captura NAPROC-13: compuesto 1, clave phl13_148_1.	86
38	Captura NAPROC-13: compuesto 2, clave phl13_148_2.	86
39	Captura NAPROC-13: compuesto 1, clave ejc16_7582_1.	90
40	Porcentaje de grupos de compuestos introducidos en la base de datos NAPROC-13.	93
41	Porcentaje de tipos de compuestos introducidos en NAPROC-13.	92
42	Estructura de montecrinanos 1–3 aislados de <i>C. vulcanicola</i> .	93
43	Estructuras introducidas en NAPROC-13 de montecrinanos 1–3.	94
44	Compuesto 1, clave: ejc16_7582_1.	94
45	Compuesto 3, clave: bmc06_1573_3.	94
46	Compuesto 5, clave: np05_1018_5.	96
47	Compuesto 2 y 5, claves: bmc06_157_2 y bmc06_157_5.	97

## INDICE DE TABLAS

<b>Tabla N°</b>		<b>Pág. N°</b>
1	Códigos SMILES de diversos compuestos y reacciones químicas.	37
2	Código JME y SMILES del compuesto calealactone A.	39
3	Set de herramientas de edición del Applet JME del editor de JME-X.	42
4	Información recuperada del compuesto triterpénico 7.	52
5	Código SMILES y JME del compuesto triterpénico 7.	54
6	Incidencia de palabras claves.	63
7	Ficha de artículo seleccionado: familia Lamiaceae.	65
8	Ficha de artículo seleccionado: familia Solanaceae.	65
9	Ficha de artículos seleccionados: familia Asteraceae.	66
10	Ficha de artículo seleccionado: familia Piperaceae.	66
11	Ficha de artículos seleccionados: familia Celastraceae.	66
12	Distribución de artículos según año de publicación.	70
13	Distribución de artículos según familia botánica.	71
14	Distribución de especies vegetales por número de artículos.	73
15	Cantidad de estructuras por familias introducidas en NAPROC-13.	89
16	Cantidad de estructuras por grupos introducidas en NAPROC-13.	91
17	Cantidad de estructuras por tipo introducidas en NAPROC-13.	92

## INDICE DE ANEXOS

### Anexo N°

- 1 Flujo de trabajo típico de descubrimiento de PN y proyectos de metabolómica.
- 2 Diagrama costo vs tiempo: método de desreplicación convencional y basada en el búsqueda y comparación de resultados en bases de datos espectrales.
- 3 Estructuras generadas familia: Asteraceae
- 4 Estructuras generadas familia: Solanaceae
- 5 Estructuras generadas familia: Celastraceae

## ABREVIATURAS

<b>2D</b>	Dos Dimensiones
<b>3D</b>	Tres Dimensiones
<b>CDCI3</b>	Cloroformo Deuterado
<b>DOI</b>	Digital Object Identifier (Identificador de Objetos Digitales)
<b>H-H COSY</b>	Espectroscopia de correlación
<b>H-C HMQC</b>	Espectroscopia de correlación cuántica simple heteronuclear
<b>H-C HMBC</b>	Espectroscopia de correlación de enlaces múltiples heteronucleares
<b>IR</b>	Espectroscopía infrarroja
<b>IUPAC</b>	The International Union of Pure and Applied Chemistry (Unión Internacional de Química Pura y Aplicada)
<b>JME</b>	Java Math Expression
<b>MHz</b>	Megahercio
<b>PN</b>	Producto Natural
<b>Ppm</b>	Partes Por Millón
<b>RMN <sup>13</sup>C</b>	Espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear de Carbono 13
<b>SMILES</b>	Simplified Molecular Input Line Entry System
<b>TMS</b>	Estándar de Tetrametilsilano
<b>URL</b>	Uniform Resource Locator (Localizador de Recursos Uniforme)

## RESUMEN

El acceso a bases de datos es esencial para la desreplicación de compuestos en la investigación de productos naturales. La eficacia de este proceso depende en gran medida de la comparación efectiva de propiedades químicas y espectroscópicas de resonancia magnética nuclear de carbono 13, con estructuras de referencia. A raíz de ello surge NAPROC-13, plataforma de acceso gratuito alojada en la URL: <https://c13.materia-medica.net/> de la Universidad de Salamanca en España, que proporciona al investigador herramientas que facilitan la desreplicación de compuestos durante la investigación. Actualmente, El Salvador no cuenta con una base datos de productos naturales, por lo tanto, es necesario una plataforma para introducir toda la información estructural y espectroscópica investigada. Este trabajo de grado presenta la introducción a NAPROC-13 de 110 metabolitos secundarios aislados de especies vegetales salvadoreñas, convirtiéndolos a códigos SMILES y JME utilizando la aplicación quimioinformática JME-X, a partir información recopilada de 25 artículos científicos seleccionados en los meses de octubre del 2021 a marzo del año 2022. La búsqueda de los artículos se realizó en bases de datos y se sometieron a un análisis de contenido. Se concluye que la totalidad de las estructuras introducidas eran nuevas en NAPROC-13 en el momento del depósito, resaltando la inclusión de una nueva categoría por tipo de un esqueleto novedoso: montecrinanos. Esto permitirá a los investigadores emplear con eficacia técnicas de elucidación de sustancias con estructuras relacionadas, utilizando búsquedas iterativas dentro de la plataforma, identificando compuestos puros o un compuesto dentro de una mezcla. Además de realizar un seguimiento bibliográfico sobre compuestos identificados en el país, ya que al ser de interfaz en línea permitirá la exposición de la investigación en El Salvador. Se recomienda implementar JME-X y NAPROC-13 en docencia, investigación y trabajos de grado de la Facultad de Química y Farmacia de la Universidad de El Salvador.

**CAPITULO I**  
**INTRODUCCION**

## I. INTRODUCCION

Debido al auge de la informática, los métodos, técnicas y herramientas computacionales se involucran cada vez más en la labor del investigador de productos naturales (PN), principalmente como resultado de un crecimiento exponencial de la cantidad de información para procesarse y analizarse durante el aislamiento e identificación de estructuras. Existen plataformas aisladas que funcionan como reservorio de información de PN, con datos extensos y confiables, que pueden ser utilizadas para facilitar el proceso de desreplicación durante la investigación científica, pero limitadas por su alto costo de acceso. En contraste, encontramos plataformas gratuitas limitadas por su escasa información y datos poco confiables, pero con libre acceso a todos los usuarios.

Actualmente no existe una plataforma gratuita que pueda presentar de manera efectiva todos los metabolitos descubiertos, y el motivo es que clasificarlos y caracterizarlos no es una tarea fácil e implica la optimización de la información, así como algoritmos de inteligencia artificial adaptados a este grupo de compuestos químicos. A raíz de esto surge NAPROC-13, que sobresale por su gran colección de PN (cerca de 25,000) y la inclusión de la clasificación de metabolitos secundarios, incorporando espectros para compuestos que representan todas las principales clases de productos naturales, destacando entre las bases de datos espectrales de acceso abierto en términos de amplitud como de profundidad en su motor de búsqueda.

La utilidad de esta base de datos está determinada por la información estructural y espectroscópica de PN que se le ingresen. Por ello, en este proyecto se planteó introducir estructuras de PN aislados de especies vegetales nativas de El Salvador, mediante una recopilación bibliográfica de publicaciones científicas de aislamiento e identificación de metabolitos secundarios en que se haya utilizado la espectroscopia de resonancia magnética nuclear de carbono 13 (RMN  $^{13}\text{C}$ )

como técnica de elucidación de estructuras moleculares, realizadas por la Universidad de El Salvador a través del laboratorio de Investigación en Productos Naturales de la facultad de Química y Farmacia, así como también investigaciones independientes. Dando como resultado la obtención de 25 publicaciones que cumplieron con los parámetros de inclusión y exclusión establecidos, y que tras su procesamiento se extrajeron 110 estructuras de compuestos novedosos y ya conocidos, que posteriormente fueron incluidos en la base de datos NAPROC-13 haciendo uso de la herramienta quimioinformática JME-X para convertir las estructuras en códigos SMILES y JME.

El procesamiento e introducción de la información estructural y espectroscópica de las 110 estructuras a la base de datos NAPROC-13, ayudará a los investigadores a realizar búsquedas de compuestos con propiedades espectrales específicas o estructuras relacionadas de cierta especie vegetal de interés, gracias a la naturaleza de referencia de la base de datos a través de la inclusión del DOI de los 25 artículos seleccionados, realizando un seguimiento bibliográfico sobre PN identificados en el país.

Los investigadores que trabajen en el aislamiento de PN podrán utilizar NAPROC-13 para encontrar fácilmente información específica de cualquiera de las 110 estructuras introducidas, además podrán descargar toda la información para uso propio durante la investigación, garantizando que los datos se puedan reproducir y permita a los usuarios investigar las fuentes de referencia para obtener más información. También siendo de utilidad para comprobar rápidamente si los compuestos aislados en el trabajo actualmente en curso se han encontrado anteriormente en especies nativas o extranjeras sobre un amplio grupo de compuestos ya incluidos en NAPROC-13, facilitando así no solo el proceso de desreplicación, sino también acelerará la identificación de compuestos desconocidos.

**CAPITULO II**  
**OBJETIVOS**

## **II. OBJETIVOS**

### **2.1. OBJETIVO GENERAL**

Introducir información estructural y espectroscópica (RMN  $^{13}\text{C}$ ) de metabolitos secundarios aislados de flora salvadoreña en la base de datos de la aplicación NAPROC-13.

### **2.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS**

- 2.2.1. Realizar una búsqueda de publicaciones científicas que contengan datos espectroscópicos RMN  $^{13}\text{C}$  de metabolitos secundarios aislados de especies vegetales de la flora salvadoreña.
- 2.2.2. Generar estructuras electrónicas de los metabolitos encontrados, mediante el uso de la herramienta digital quimioinformática JSME-X\_2020.
- 2.2.3. Transformar las estructuras de grafos de cada uno de los metabolitos en códigos de texto JME y SMILES, que se incorporarán en archivos EXCEL junto a cada tipo de carbono (C, CH, CH<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>) y sus correspondientes desplazamientos químicos de RMN  $^{13}\text{C}$ .
- 2.2.4. Introducir en la base de datos de la aplicación NAPROC-13 la información estructural (códigos JME y SMILES) y espectral de los metabolitos secundarios encontrados, además de la Familia, tipo y grupo al que corresponden.

**CAPITULO III**  
**MARCO TEORICO**

### III. MARCO TEORICO

#### 3.1. BASE DE DATOS NAPROC-13

NAPROC-13 es una base de datos de productos naturales (PN) que actualmente cuenta con información espectroscópica de cerca de 25,000 metabolitos secundarios, que nació a partir de la iniciativa del Dr. José Luis López Pérez, autor principal y desarrollador de la herramienta, cuya formación y vinculación a la investigación de PN lo llevó a descubrir la necesidad de contar con una aplicación que facilite a los investigadores la tediosa tarea de la elucidación estructural de PN. Se encuentra alojada en la URL: <https://c13.materia-medica.net/>. Es de acceso gratuito y no se necesita licencia para uso académico. Tiene como objetivo proporcionar al investigador herramientas que faciliten la búsqueda e identificación estructural de compuestos naturales durante el proceso de investigación.

Contiene los siguientes motores de búsqueda: nombre (familia, tipo y grupo del metabolito secundario, su fórmula y peso molecular, nombre trivial y sistemático, al igual que una búsqueda bibliográfica), subestructura (estereoquímica), iterativa (desplazamientos químicos) y por tipos de carbono. NAPROC-13 permite una buena representación de PN, utilizando coordenadas cartesianas que mejoran la disposición espacial de la estructura y permite una mejor apreciación de los estereocentros, además de utilizar un sistema de numeración homogéneo que permite la comparación entre listas de datos espectrales de una variedad de estructuras relacionadas. Las entradas en la base de datos corresponden a compuestos registrados como metabolitos secundarios identificados mediante el uso de RMN  $^{13}\text{C}$  en investigaciones científicas. En todas y cada una de las estructuras que aparecen en la base de datos, se hace referencia a la fuente de procedencia, es decir, los datos bibliográficos de la publicación, además de permitir mediante un link DOI acceder a la fuente original de publicación. (4,5)

## 3.2. ESTRUCTURA DE BASE DE DATOS

### 3.2.1. Página de inicio

La página de inicio o home de NAPROC-13 es el elemento más importante, ya que es la primera página que se muestra cuando se abre la plataforma. Su función es de facilitar al usuario el acceso a las demás subpáginas a través de un menú con los enlaces para las funcionalidades de la aplicación (Figura N° 1).

**NAPROC-13** BÚSQUEDA HISTORIAL

### Base de datos de Carbono<sup>13</sup> de Productos Naturales y Relacionados

Dispone de una serie de herramientas que facilitan la identificación estructural de Productos Naturales

**NAPROC-13**

A tool for a rapid identification of Natural Products

UNIVERSIDAD DE SALAMANCA COLABORADORES DESARROLLADORES AYUDA AGRADECIMIENTOS CONDICIONES DE USO Dpto. de Ciencias Farmacéuticas Dr. José Luis López Pérez lopez@usal.es

Figura N° 1. Página de inicio NAPROC-13.

El usuario que accede a la página de inicio desea conocer rápidamente las funcionalidades de la aplicación. El diseño gráfico de la plataforma permite que todos los elementos puedan identificarse de forma sencilla y su manejo resulta más intuitivo. Así, los usuarios con menos experiencia pueden entender las funciones de la base de datos a través del menú home de NAPROC-13, ya que

posee una ordenada división entre contenido y diseño que propicia una experiencia intuitiva y dinámica para llevar a los visitantes a las páginas específicas que les interesen. Además, en la parte inferior aparece el link “Ayuda” disponible en los distintos idiomas que el usuario puede consultar en cualquier momento. Actualmente, NAPROC-13 está disponible en los idiomas español, inglés, francés, alemán, italiano y portugués. La plataforma NAPROC-13 presenta el siguiente menú de funcionalidades y subpáginas:

- Registro:

Esta subpágina hace referencia a la interfaz de registro, permite al usuario registrarse en la aplicación, condición imprescindible para acceder a la plataforma. Se presenta como un formulario simple y conciso (solicita solo los datos de interés). Al seleccionar esta opción se despliega una ventana donde el usuario deberá rellenar varios campos con su información; una vez rellenados estos campos se presiona registrar (Figura N° 2).

The image shows a web registration form for NAPROC-13. The form is titled "Registrar" and is set against a white background with a red header. The header contains the NAPROC-13 logo on the left and the words "BÚSQUEDA" and "HISTORIAL" on the right. The registration form itself consists of several input fields, each with a label to its left: "Usuario", "Contraseña", "Confirmar contraseña", "Nombre", "E-Mail", "Organización/Universidad", "Ciudad", and "País". Each input field is a simple white box with a thin border. At the bottom center of the form, there is a red button with the word "Registrar" written in white text.

Figura N° 2. Interfaz de registro de NAPROC-13.

- Iniciar sesión:

Al seleccionar inicio de sesión se despliega una ventana donde el usuario deberá completar los campos de nombre de usuario y contraseña antes de presionar entrar (Figura N° 3). El nombre de usuario será siempre la dirección de correo electrónico con el que se haya registrado y la contraseña, la definida por el usuario. Si el usuario olvida o quiere cambiar la contraseña, deberá seleccionar la caja “Recordar”. De esta manera, la aplicación le enviará un correo a la dirección establecida para que el usuario pueda definir una nueva contraseña.

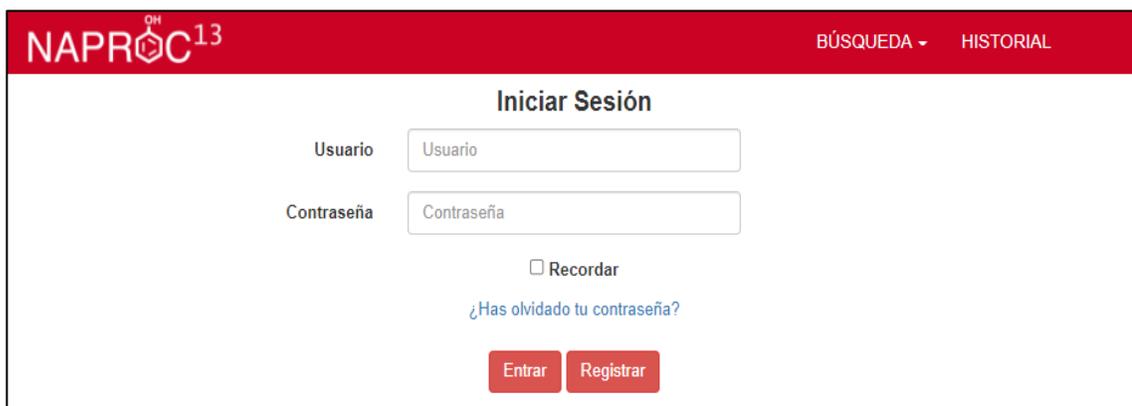


Figura N° 3. Interfaz de inicio de sesión de NAPROC-13.

- Colaboradores:

Comprende un listado de todos los profesores y estudiantes que han generado estructuras de PN, junto con su información espectral y desplazamientos químicos que han sido incorporados en NAPROC-13.

- Desarrolladores:

Muestra el listado de estudiantes de informática del módulo de Formación Profesional de la Universidad de Salamanca, España que ha colaborado en el desarrollo del software de la plataforma.

- Ayuda:

La interfaz de ayuda sirve como guía al usuario de la plataforma para la navegación por la misma y para conocer las funcionalidades de la aplicación.

### 3.2.2. Interfaz de búsquedas

NAPROC-13 mejora significativamente la búsqueda de información espectroscópica en la web, al integrar un sistema complejo de búsquedas de desplazamientos químicos numéricos basadas en la estructura de cada compuesto. El esquema básico de la base de datos está organizado relacionamente y las estructuras moleculares se definen y almacenan con dos códigos alfanuméricos: JME y SMILES. Los datos de RMN  $^{13}\text{C}$  se organizan en forma de una lista numérica de desplazamientos químicos, multiplicidad de cada átomo de carbono y siempre están asociados con la estructura de cada compuesto. Se pueden crear consultas sencillas y más complejas. La aplicación permite realizar búsquedas flexibles por nombre, subestructura química, por características espectrales, desplazamientos químicos y multiplicidad de las señales, es decir, por el tipo de carbono en función del número de hidrógenos que soporta: 0, 1, 2 o 3. Todas las búsquedas realizadas durante la sesión abierta se guardan en el historial de búsquedas y estas se pueden combinar utilizando los operadores booleanos AND y NOT, lo que posibilita la realización de búsquedas más complejas y selectivas. <sup>(5)</sup>

- Búsqueda por nombre:

Presenta un formulario que cuenta con un conjunto de filtros de búsqueda, que pueden ser utilizados de forma individual o de forma combinada, es decir que el usuario puede aplicar más de un filtro de búsqueda, rellenando o dejando en blanco los campos que desee.

El primer filtro consiste en la clasificación estándar del compuesto, de manera que se puede filtrar por familia, tipo y grupo. La búsqueda consiste en desplegar la lista de la primera opción, siendo esta la correspondiente a las familias disponibles en la base de datos. Una vez seleccionada esta opción, aparecen los tipos disponibles para esa familia si los hubiera. Si se selecciona un determinado tipo, a su vez, aparecerán todos los grupos pertenecientes a ese tipo si los hubiera (Figura N° 4). Ejemplo de familia: terpenoides, ejemplo de tipo: triterpenoides y ejemplo de grupo: oleananos.

Figura N° 4. Formulario de búsqueda por nombre.

El segundo filtro es por fórmula molecular, en donde el usuario puede escribir la fórmula del compuesto identificado en su investigación. Se puede incluir la fórmula molecular completa o parcial y se puede añadir un número detrás del símbolo atómico o un asterisco (\*), si desea buscar sólo el símbolo atómico. También se puede indicar el peso molecular pudiendo colocar un valor máximo y

mínimo, que resultará útil en el caso de no conocer de forma precisa este valor (Figura N° 4).

La búsqueda por nombre trivial consiste en colocar aquel nombre común, propio o vulgar de cada compuesto que no está sometido a ninguna regla convencional de la IUPAC, la búsqueda por nombre semisistemático consiste en introducir aquel nombre sometido a reglas convencionales de la IUPAC. Incluye un motor de búsqueda por bibliografía, en donde se puede filtrar según el nombre del autor(es) del artículo científico de investigación de cada compuesto, al igual que la revista donde ha aparecido publicado dicho artículo. <sup>(5)</sup>

- Búsqueda por subestructura:

NAPROC-13 organiza todas sus entradas en clases estructurales basadas en código SMILES, lo cual permite la búsqueda de subestructuras para identificar motivos moleculares comunes. Los compuestos se clasifican en clases de metabolitos principales según su subestructura molecular, por tal motivo esta interfaz cuenta con un editor de moléculas (JME Molecular Editor), es decir, un programa para la entrada y edición de la estructura de interés y un filtro de clasificación estándar de compuestos. <sup>(5,7)</sup>

Este editor de estructuras permite al usuario dibujar varios fragmentos que pueden o no estar relacionados entre sí. JME tiene un panel que acelera la creación de estructuras y utiliza las recomendaciones de la IUPAC para representar la estereoquímica de cada compuesto (Figura N° 5). Al usar este panel es posible generar subestructuras preformadas (ciclos de diferentes tamaños, anillos aromáticos, enlaces simples, múltiples y átomos de uso frecuente). El panel de control permite ingresar directamente grupos funcionales (ácidos carboxílicos, grupos nitro y otros grupos). Este applet facilita mucho la tarea de generar estructuras de forma rápida, agilizando así el proceso de

búsqueda. (7) Este tipo de búsqueda únicamente permite decidir si la subestructura requerida (por ejemplo, un anillo bencénico) se encuentra contenida o no en las estructuras de los compuestos a buscar dentro de la base de datos, resultando una búsqueda bastante general, a no ser que se incluya además el filtro según familia, grupo y tipo de compuesto. (5)

The screenshot shows the 'Búsqueda por subestructura' (Substructure Search) interface in NAPROC 13. The interface is divided into several sections:

- Header:** 'NAPROC 13' logo on the left, and 'BÚSQUEDA' and 'HISTORIAL' tabs on the right.
- Title:** 'Búsqueda por subestructura' centered at the top of the main area.
- Left Panel:** A vertical toolbar with icons for drawing and editing molecules, and a vertical list of element symbols: C, N, O, S, F, Cl, Br, I, P, X.
- Right Panel:** Search filters including:
  - 'Estereoquímica' (Stereochemistry) set to 'ON'.
  - 'Familia' (Family) dropdown menu.
  - 'Tipo' (Type) dropdown menu.
  - 'Grupo' (Group) dropdown menu.
  - A red 'BUSCAR' (SEARCH) button.
- Bottom:** A small footer text: 'JSME Molecular Editor by Peter Ertl and Bruno Bienfait'.

Figura N° 5. Formulario de búsqueda por subestructura.

- Búsqueda por desplazamiento o iterativa:

Esta base de datos ofrece varias alternativas en el proceso de búsqueda de desplazamientos químicos. Siempre se puede establecer la multiplicidad para cada desplazamiento y esto constituye una restricción de búsqueda útil. No obstante, también se puede llevar a cabo una búsqueda por desplazamientos químicos sin restricción de la multiplicidad para alguno o todos los carbonos, lo que resultará de utilidad, por ejemplo, cuando hay dudas sobre la multiplicidad de alguna de las señales o se sospecha que dos señales se encuentren superpuestas. La búsqueda se puede realizar para una posición específica en la molécula (Figura N° 6).

El sistema permite formular la consulta con cualquier número de carbonos, desde uno hasta la totalidad de los carbonos de la molécula en estudio. Por defecto, la aplicación establece una desviación (tolerancia) predeterminada (+/- 2 ppm) para todos los desplazamientos químicos, pero el usuario puede determinar una desviación específica para cada carbono. Es interesante poder repetir la búsqueda con diferentes desviaciones y seleccionar la búsqueda que proporcione los mejores resultados. Si la desviación es demasiado pequeña, puede ocurrir que no se seleccione algún compuesto interesante. De esta forma, se puede obtener un número razonable y manejable de compuestos. Incluso una búsqueda basada solo en los carbonos más significativos del compuesto estudiado conducirá a la identificación de la familia a la que pertenecen. (5)

The screenshot shows the 'Búsqueda por desplazamiento' (Search by displacement) interface. At the top, there is a red header with the NAPROC<sup>13</sup> logo on the left and 'BÚSQUEDA' and 'HISTORIAL' on the right. The main content area has a title 'Búsqueda por desplazamiento' and several interactive elements:

- Three red buttons: 'Borrar', 'Añadir', and 'Tolerancia'.
- Three red buttons: 'δ', 'Tipo de Carbono', and 'Tolerancia'.
- A text input field for the chemical shift (δ).
- A dropdown menu for 'Tipo de Carbono' with 'C' selected.
- A text input field for 'Tolerancia' with the value '2'.
- Three dropdown menus for 'Familia', 'Tipo', and 'Grupo', all showing '---'.
- A dropdown menu for 'Nivel de búsqueda' with 'All conditions' selected and a help icon (?) to its right.
- A red 'BUSCAR' button at the bottom.

Figura N° 6. Formulario de búsqueda por desplazamiento.

La búsqueda iterativa es probablemente la búsqueda más genuina y funcional de esta aplicación para la elucidación de compuestos aislados y purificados o de una mezcla de estos. El usuario puede incluir en su búsqueda desde un desplazamiento químico de RMN <sup>13</sup>C hasta la totalidad de las señales del metabolito bajo estudio. Esta herramienta posee dos modalidades. Por defecto,

realizará una búsqueda de todos los cambios químicos introducidos. No obstante, si no encuentra ninguna estructura que cumpla todos los requisitos, podemos indicar que realice una nueva búsqueda iterativa por todos los cambios excepto uno, realizando todas las combinaciones posibles hasta que encuentre un compuesto que cumpla con alguno de los requisitos establecidos.

Mediante esta búsqueda, se encontrarán aquellos compuestos que posean un número máximo de desplazamientos similares a los buscados según la tolerancia que se especifique. Por ejemplo, se podrían introducir 20 desplazamientos químicos y obtener compuestos que presenten 12 desplazamientos comunes con los establecidos en la búsqueda. Los compuestos encontrados aparecerán ordenados según la similitud de sus desplazamientos con los introducidos en la búsqueda. <sup>(5)</sup>

- Búsqueda por tipos de carbono:

Permite al usuario buscar compuestos según el número que posean de distintos tipos de Carbono (C, CH, CH<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>). También se pueden establecer en la búsqueda el número de carbonos unidos a oxígeno y nitrógeno, así como el número de heteroátomos.

El usuario puede establecer un número concreto para cada tipo de átomo o establecer un intervalo. Dispone de un sistema de barras con dos marcadores para establecer el intervalo de forma rápida y sencilla.

La búsqueda es completamente configurable, basta con pulsar los botones del panel superior donde aparece el número de opciones disponibles, en ella se solicita la inserción del número de barras necesarias (Figura N° 7). Establecido este número, ya se puede colocar el tipo de carbono y los heteroátomos por los que se desea realizar la búsqueda. <sup>(5)</sup>

Esta opción se puede establecer solamente para el esqueleto o para toda la estructura del compuesto, los tipos de átomos que se pueden seleccionar son: esqueleto (C\*, CH\*, CH<sub>2</sub>\*, CH<sub>3</sub>\*, C-O\*, CH-O\*, CH<sub>2</sub>-O\* y CH<sub>3</sub>-O\*) y estructura total (C, CH, CH<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>, C-O, CH-O, CH<sub>2</sub>-O, CH<sub>3</sub>-O, Br, Cl, F, H, I, N, O, P y S).

Figura N° 7. Formulario de búsqueda por tipos de carbono.

- Resultados de búsqueda:

Una vez seleccionada la opción “Buscar”, la plataforma presenta un listado de resultados que concuerdan con los términos de búsqueda que hemos introducido. En la parte superior de esta interfaz están ubicados tres criterios de selección, el primero de ellos es la opción de mostrar en cada resultado la numeración de los carbonos, el segundo mostrará el desplazamiento químico sobre cada carbono y el tercero eliminará la numeración de los carbonos y sus desplazamientos químicos, mostrando solamente la estructura grafica en 2D del compuesto. En la parte inferior estará ubicada una barra de selección numérica

que permitirá el desplazamiento entre páginas, dependiendo de la cantidad de resultados que nuestra búsqueda arroje (Figura N° 8). (5)

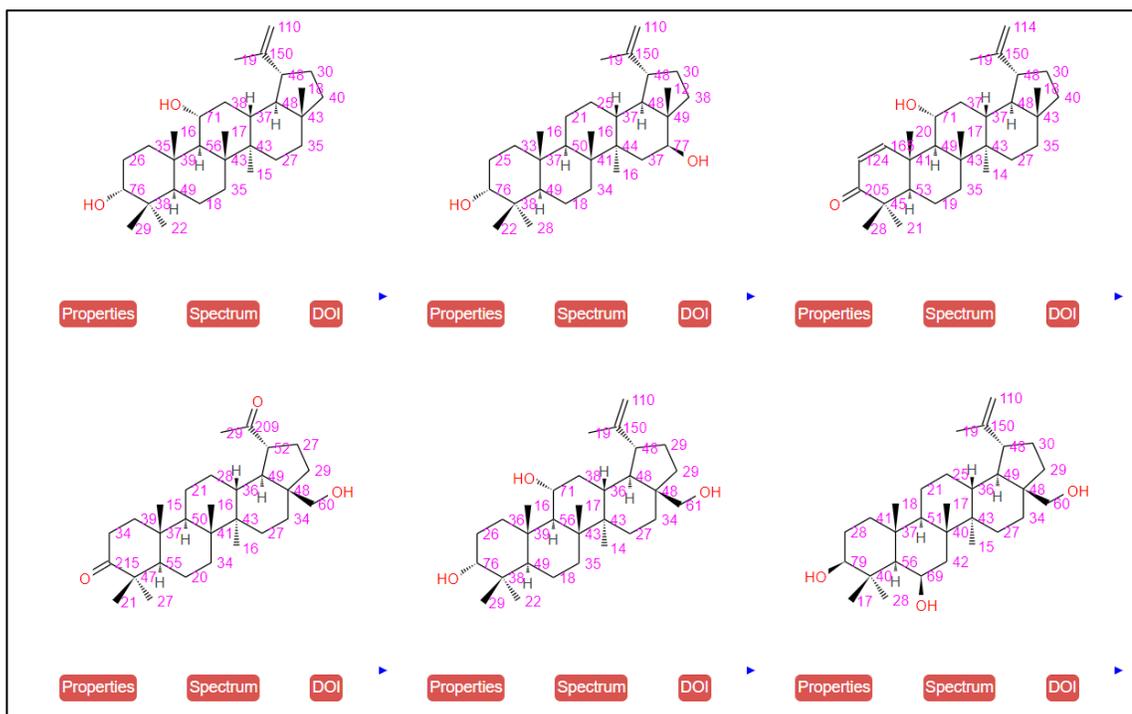


Figura N° 8. Resultado de búsqueda con criterio introducido por autor: Núñez.

Por defecto veremos en la parte inferior de cada estructura, tres enlaces que proporcionan información de cada uno de los compuestos encontrados. El primero “Propiedades” sirve para acceder a las propiedades químicas del compuesto. El segundo, botón DOI (Digital Object Identifier) es una forma de identificar un objeto digital (en este caso, un artículo electrónico de una revista) sin importar su URL, de forma que, si ésta cambia, el objeto sigue teniendo la misma identificación. Al pulsarlo, nos abrirá una página web con la publicación original. Si la publicación es de libre acceso podrá descargarla; en caso contrario, solo tendrá acceso al resumen y la presentación de la publicación, necesitando una suscripción personal o institucional para el acceso a la información completa. El tercero sirve para representar su espectro de forma gráfica, el cual nos podrá servir para comparar con el espectro obtenido experimentalmente.

Seleccionando la opción “Propiedades” en la estructura de interés se muestra toda la información del compuesto, su nombre trivial, nombre sistemático, clase de compuesto (familia, grupo y tipo), disolvente deuterado (utilizado durante la obtención de los datos de RMN  $^{13}\text{C}$ ), fórmula molecular, peso molecular, bibliografía de donde se obtuvo la información espectral, una tabla con los desplazamientos químicos RMN  $^{13}\text{C}$  y su estructura molecular 2D (Figura N° 9).

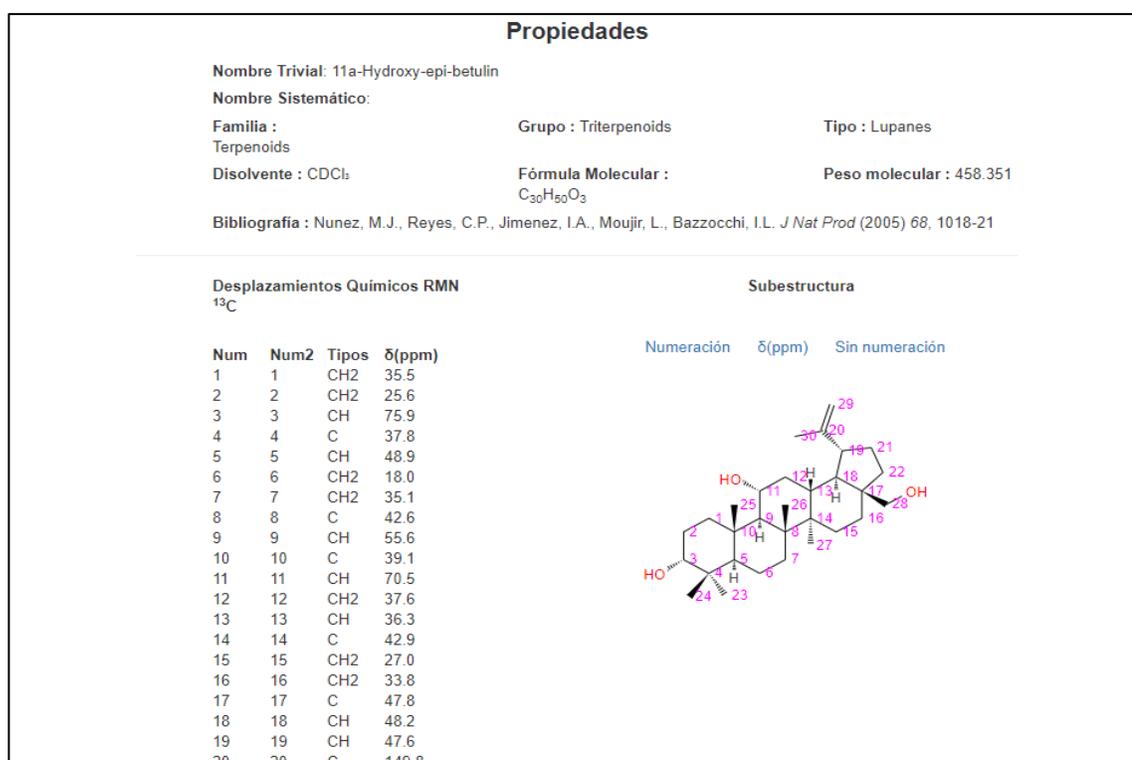


Figura N° 9. Propiedades químicas del **compuesto 11a-hydroxy-epi-betulin**.

Seleccionando la opción “Espectro” en la estructura de interés, se muestra toda la información espectral de los desplazamientos químicos RMN  $^{13}\text{C}$  del compuesto, representando todas las señales características de cada carbono de forma interactiva con la estructura 2D. Los espectros se desglosan en tres gráficos, el primero de ellos muestra las señales de los carbonos primarios, secundarios y terciarios, el segundo de ellos muestra las señales solamente de los carbonos terciarios y el último muestra las señales de los carbonos primarios,

secundarios, terciarios y cuaternarios, además de incluir las señales del disolvente deuterado. En la parte inferior de esta interfaz se encuentra habilitada la opción de imprimir/descargar en formato PDF toda la información espectral del compuesto seleccionado (Figura N° 10). El espectro se muestra de forma interactiva, ya que se puede seleccionar una determinada zona del espectro y ampliarlo, además de presentar las multiplicidades de los carbonos codificadas por colores. Esta opción resulta muy útil cuando aparecen señales en el espectro muy próximas.

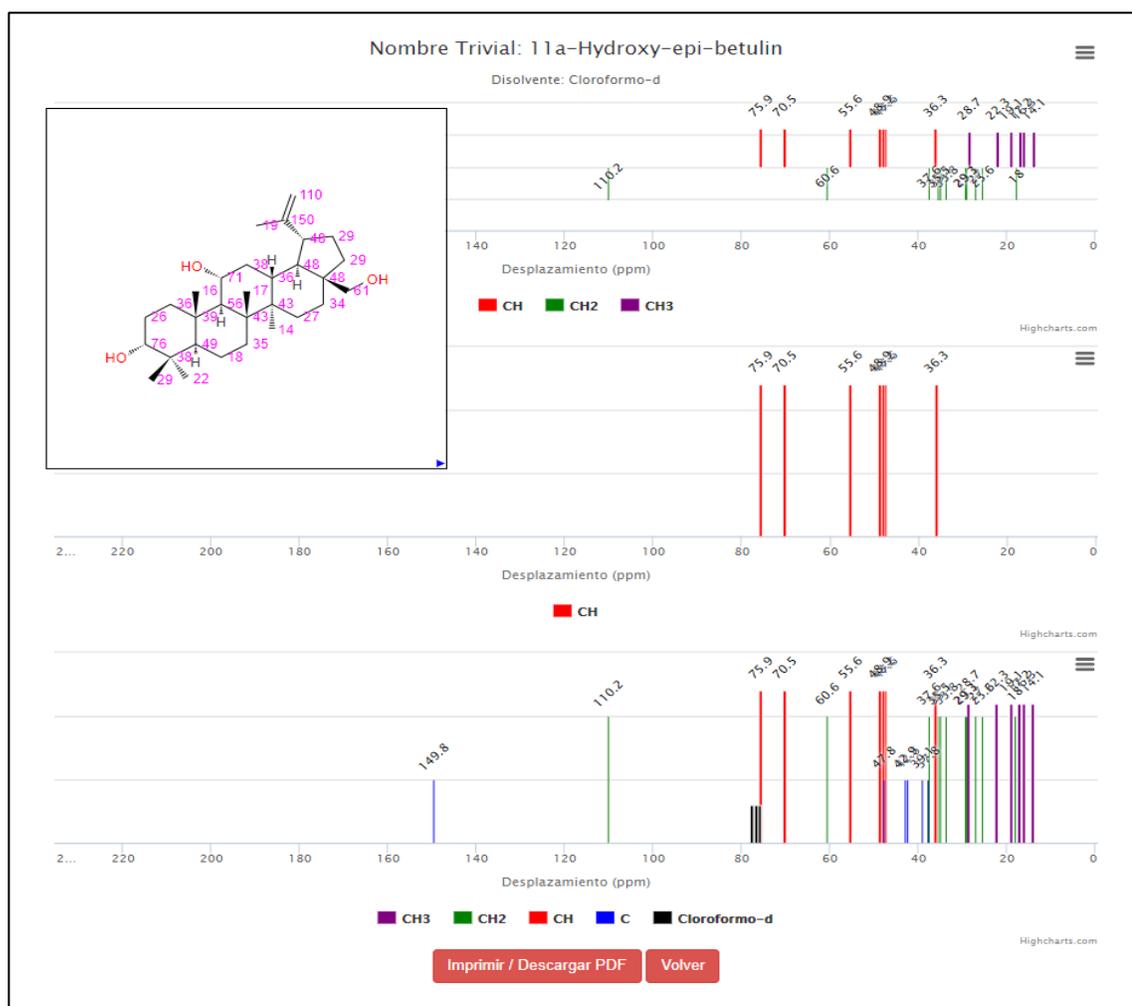


Figura N° 10. Propiedades espectrales del **compuesto 11a-hydroxy-epi betulin.**

- Historial:

Cuando se pulsa el botón "Buscar" en cualquiera de las búsquedas, el resultado de la selección aparecerá posterior en una página con el historial de las búsquedas realizadas. Cada una de las búsquedas llevadas a cabo se define en una línea y aparecen ordenadas de forma correlativa. En cada una de ellas se especifica el número de búsqueda, el número de compuestos encontrados y el criterio que se ha utilizado. Disponen de un cuadro para su eliminación y otro para su activación con el fin de realizar posteriores búsquedas booleanas con "OR" o "AND" entre los distintos resultados obtenidos. Las estructuras encontradas se pueden visualizar pulsando el botón "Ver resultados". (5)

<input type="checkbox"/>	Nº de búsqueda	Nº de compuestos	Criterio de búsqueda	Ver Resultados
<input type="checkbox"/>	1	53	<b>Autores:</b> Nuñez	<a href="#">Ver Resultados</a>
<input type="checkbox"/>	2	17727	<b>Familia:</b> Terpenoids	<a href="#">Ver Resultados</a>
<input type="checkbox"/>	3	49	<b>Autores:</b> Nuñez <b>and</b> <b>Familia:</b> Terpenoids	<a href="#">Ver Resultados</a>
<input type="checkbox"/>	4	17732	<b>Autores:</b> Nuñez <b>or</b> <b>Familia:</b> Terpenoids	<a href="#">Ver Resultados</a>

And
  Or
  1 not 2
  2 not 1

Figura N° 11. Interfaz historial de búsqueda de la sesión actual.

El historial de búsqueda permite realizar combinaciones de resultados en base a criterios utilizados, por ejemplo, en la Figura N° 11 en el número de búsqueda 1 se utilizó como criterio el autor "Núñez", el resultado arrojó que en toda la

plataforma NAPROC-13 hay 53 compuestos bajo ese apellido de referencia. En el número de búsqueda 2 se utilizó como criterio la familia del compuesto “terpenoides” arrojando 17,727 compuestos que pertenecen a dicha familia en la aplicación. En el número de búsqueda 3 se realizó una combinación de la búsqueda 1 y 2 pero con el criterio “AND” cuyo resultado concluyó que de los 53 resultados bajo el autor “Núñez” 49 pertenecen a la familia de “terpenoides” y el número de búsqueda 4 muestra la combinación de las búsquedas 1 y 2 pero bajo el criterio “OR” donde muestra el resultado de 17,732 compuestos bajo el autor “Núñez” y familia de “terpenoides” en conjunto.

### **3.3. EDITOR DE MOLÉCULAS JME-X**

Las herramientas de fácil acceso con interfaces fáciles de usar, especialmente integradas en aplicaciones de escritorio de uso habitual, pueden mejorar el impacto de la química informática en la investigación de PN. Un editor de moléculas, es decir, un programa que facilita la entrada gráfica y la edición interactiva de estructuras de compuestos químicos, es una parte indispensable de cualquier sistema de procesamiento químico.

JME-X es un editor de moléculas de uso gratuito alojado en la URL: [https://c13.materia-medica.net/JSME-X\\_2020/](https://c13.materia-medica.net/JSME-X_2020/). Dispone de un conjunto de herramientas y funcionalidades empleadas dentro de páginas HTML, que admite el dibujo y la edición de moléculas en computadoras de escritorio, así como en dispositivos de mano, incluidos teléfonos inteligentes y tabletas. <sup>(2)</sup> El editor es capaz de transformar las estructuras químicas en código “SMILES” o en el formato compacto “JME” (representación textual de una línea de una molécula que incluye también coordenadas atómicas 2D) y a la vez generar sus correspondientes tablas de conectividad junto a las coordenadas cartesianas de cada uno de los átomos. El código SMILES generado por JME-X es canónico, es decir, independiente de la forma en que se dibujó la molécula. <sup>(8)</sup>

### 3.3.1. Código SMILES

SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System) es una notación de línea (un método tipográfico que utiliza caracteres imprimibles) para introducir y representar moléculas y reacciones, permite a un usuario representar una estructura química de una manera que puede ser utilizada por un ordenador. (1)

Tabla N° 1. Códigos SMILES de diversos compuestos y reacciones químicas.

SMILES	NOMBRE	SMILES	NOMBRE
CC	Etano	[OH3+]	Ion de Hidronio
O=C=O	Dióxido de Carbono	[2H]O[2H]	Óxido de deuterio
C#N	Cianuro de hidrogeno	[235U]	Uranio-235
CCN(CC)CC	Trietilamina	F/C=C/F	<i>E</i> -difluoroeteno
CC(=O)O	Ácido acético	F/C=C\F	<i>Z</i> -difluoroeteno
Reacción SMILES		Nombre	
[I-].[Na+].C=CCBr>>[Na+].[Br-].C=CC		Reacción de desplazamiento	
(C(=O)O).(OCC)>>(C(=O)OCC).(O)		Esterificación intermolecular	

SMILES es un idioma verdadero, aunque con un vocabulario simple (símbolos de átomos y enlaces) y solo unas pocas reglas gramaticales. Las representaciones de SMILES de la estructura pueden, a su vez, usarse como "palabras" en el vocabulario de otros lenguajes diseñados para el almacenamiento de información química (información sobre compuestos químicos). Parte de las características esenciales del código SMILES es que existen códigos SMILES únicos para cada compuesto químico.

Con SMILES estándar, el nombre de una molécula es sinónimo de su estructura; con SMILES únicos, el nombre es universal. Cualquiera en el mundo que use este código para nombrar una molécula elegirá exactamente el mismo nombre. Esta propiedad abre muchas puertas al programador de información química (1-8). Ejemplos de usos para SMILES son:

- Claves para el acceso a la base de datos.
- Mecanismo para que los investigadores intercambien información química.
- Sistema de entrada de datos químicos.
- Parte de lenguajes para inteligencia artificial o sistemas expertos en química.

### 3.3.2. Código JME

El código JME se genera cuando se dibuja o se representa una estructura en el editor de moléculas y se pulsa el botón "EST→TEXT". La aplicación genera este código alfanumérico en una sola línea, aunque se puede desglosar en 3 partes:

- La primera parte contiene dos números separados por un espacio que indican el número de átomos y enlaces de la molécula, representado en Tabla N° 2 por letra color rojo.
- La segunda parte contiene los símbolos atómicos seguidos de sus coordenadas cartesianas X e Y, representado en Tabla N° 2 por letra color azul.
- La tercera parte constituye la "tabla de conectividad", muestra como los átomos están conectados entre sí, además de presentar el orden de enlace (1: enlace sencillo; 2: enlace doble; 3: enlace triple), representado en Tabla N° 2 por letra color verde.

La aplicación descompone estas tres partes al pulsar el botón coordenadas, lo que facilita su lectura y comprensión por parte del usuario. Este código puede resultar muy útil para cambiar/corregir la numeración de los átomos, para facilitar la numeración automática con números prima, para mejorar el aspecto de las estructuras, para facilitar su construcción y para acortar la longitud de las cuñas de los hidrógenos durante la creación de la estructura del compuesto químico de interés en el editor de moléculas JME-X. (7)

Tabla N° 2. Código JME y SMILES del compuesto calealactone A.

<b>Compuesto:</b> calealactone A	
<b>Referencia</b>	Yamada, M., Matsuura, N., Suzuki, H., Kurosaka, C., Hasegawa, N., Ubukata, M., Tanaka, T., & Inuma, M. (2004). Germacranolides from <i>Calea urticifolia</i> . <i>Phytochemistry</i> , 65(23), 3107–3111.
<b>Código JME:</b>	<b>31 32</b> C:14 3.96 8.18 C:15 0.00 3.60 C:13 6.31 1.52 O 3.96 0.00 C:2 1.50 6.95 C:1 2.68 6.13 C:3 0.38 6.06 C:9 5.21 6.13 C:8 5.54 4.75 C:5 2.36 4.73 O 2.78 2.29 C:12 3.96 1.43 C:10 3.96 6.75 C:4 0.85 4.73 C:11 5.11 2.29 C:6 3.25 3.64 C:7 4.64 3.64 O 2.79 7.52 O 3.96 5.36 O 6.96 4.63 O 6.43 6.88 C:201 8.24 3.85 C:202 9.23 4.45 O 8.24 2.31 C:204 10.34 3.85 C:203 9.26 5.61 C:101 7.55 7.75 C:102 8.47 7.14 C:103 9.48 7.81 O 7.56 9.13 C:104 8.47 5.85 13 1 -1 14 2 -1 15 3 2 4 12 2 5 6 1 5 7 2 6 13 1 7 14 1 8 9 1 8 13 1 9 17 1 10 14 1 10 16 1 11 12 1 16 11 -2 12 15 1 16 17 1 6 18 2 13 19 -2 17 15 -1 8 21 -2 9 20 -1 22 23 1 20 22 1 22 24 2 23 25 1 23 26 2 21 27 1 27 28 1 28 29 1 27 30 2 28 31 1
<b>Primera parte:</b>	<b>31 32</b>
<b>Segunda parte:</b>	C:14 3.96 8.18 C:15 0.00 3.60 C:13 6.31 1.52 O 3.96 0.00 C:2 1.50 6.95 C:1 2.68 6.13 C:3 0.38 6.06 C:9 5.21 6.13 C:8 5.54 4.75 C:5 2.36 4.73 O 2.78 2.29 C:12 3.96 1.43 C:10 3.96 6.75 C:4 0.85 4.73 C:11 5.11 2.29 C:6 3.25 3.64 C:7 4.64 3.64 O 2.79 7.52 O 3.96 5.36 O 6.96 4.63 O 6.43 6.88 C:201 8.24 3.85 C:202 9.23 4.45 O 8.24 2.31 C:204 10.34 3.85 C:203 9.26 5.61 C:101 7.55 7.75 C:102 8.47 7.14 C:103 9.48 7.81 O 7.56 9.13 C:104 8.47 5.85 13
<b>Tercera parte:</b>	1 -1 14 2 -1 15 3 2 4 12 2 5 6 1 5 7 2 6 13 1 7 14 1 8 9 1 8 13 1 9 17 1 10 14 1 10 16 1 11 12 1 16 11 -2 12 15 1 16 17 1 6 18 2 13 19 -2 17 15 -1 8 21 -2 9 20 - 1 22 23 1 20 22 1 22 24 2 23 25 1 23 26 2 21 27 1 27 28 1 28 29 1 27 30 2 28 31 1

Tabla N° 2. (Continuación).

<b>Código SMILES</b>	<chem>[CH2:203]=[C:202]([CH3:204])[C:201](=O)O[C@H:8]2[C@H:7]1[C:11](=[CH2:13])][C:12](=O)O[C@@H:6]1[CH2:5][C@@H:4]([CH3:15])/[CH:3]=[CH:2][C:1](=O)[C@:10]([CH3:14])(O)[C@@H:9]2O[C:101](=O)[CH:102]([CH3:104])[CH3:103]</chem>
----------------------	--

### 3.4. ESTRUCTURA DE EDITOR DE MOLÉCULAS JME-X

#### 3.4.1. Página de inicio

El editor JME-X muestra una interfaz intuitiva, debidamente ordenada y categorizada (Figura N° 12). Incluye un applet JME desarrollado en el lenguaje de programación Java que permite editar y representar estructuras químicas de forma gráfica. Dispone de un sistema de búsqueda que facilita la representación de los diversos esqueletos de estructuras químicas que se encuentran preformadas en la aplicación.

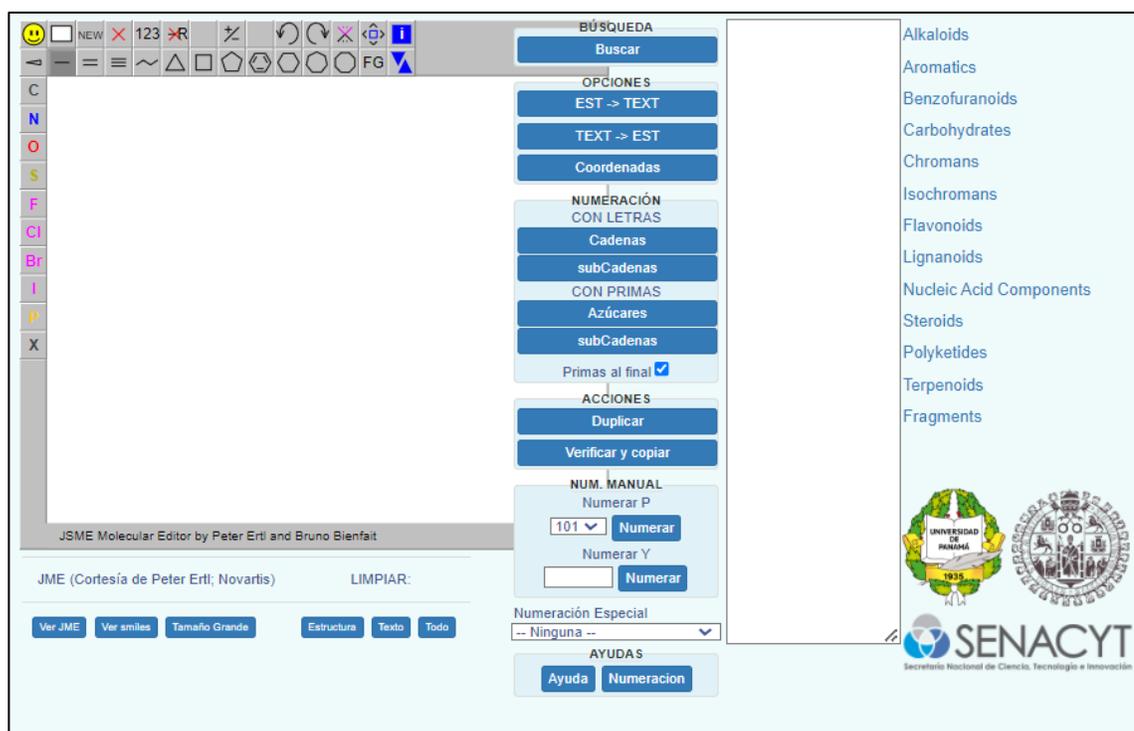


Figura N° 12. Página de inicio del editor de moléculas JME-X.

Dispone de un menú despegable con los distintos tipos de esqueletos de productos naturales clasificados por familias, grupos y tipos. Estos aparecen ya numerados de acuerdo a normativas IUPAC y sirven como modelos para facilitar la generación de estructuras.

- Applet JME:

Es un lienzo en blanco donde se creará la estructura de interés. Posee un set de herramientas interactivas que facilitan el proceso de generación de estructuras químicas. Se encuentra dividido en 2 secciones, una superior conteniendo los grupos funcionales, ciclos y cadenas de carbonos que permite la creación rápida y conveniente de sustituyentes orgánicos comunes, además de incluir herramientas propias de edición y una sección lateral izquierda que sirve para la inserción de los átomos más comunes (Figura N° 13) (Tabla N° 3). (7)

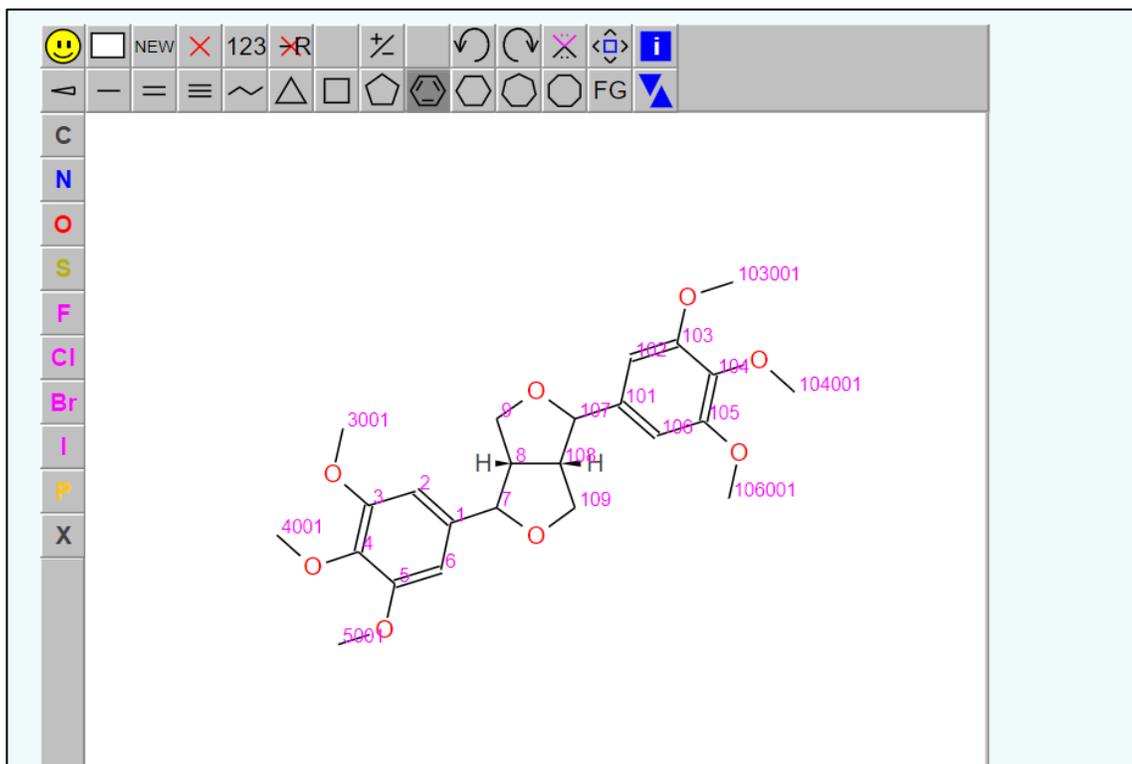


Figura N° 13. Applet JME del editor de moléculas JME-X.

Tabla N° 3. Set de herramientas de edición del Applet JME del editor de JME-X.

FUNCIONAMIENTO DEL EDITOR DE ESTRUCTURAS JME													
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12		
		NEW		123									
1	Proporciona el código SMILES de la estructura dibujada en el applet.												
2	Borra el contenido de la ventana de edición.												
3	Permite dibujar más de una estructura en la ventana.												
4	Borra el átomo o el enlace que seleccione a continuación.												
5	Permite numerar los átomos de la molécula. El incremento es de uno en uno.												
6	Borra todo el sustituyente.												
7	Cambia las cargas atómicas.												
8	Deshace el último cambio realizado.												
9	Revierte la acción deshecha, si ésta se ha activado previamente.												
10	Permite hacer anillos spiro.												
11	Expandir libremente un átomo seleccionado.												
12	Información sobre el applet JME.												
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
												FG	
1	Indicar disposiciones Beta y Alfa haciendo click alternativamente.												
2	Elegir tipo de enlace: sencillo.												
3	Elegir tipo de enlace: doble.												
4	Elegir tipo de enlace: triple.												
5	Dibujar cadenas lineales.												
6	Crear ciclos: anillo de 3 átomos de carbono.												
7	Crear ciclos: anillo de 4 átomos de carbono.												
8	Crear ciclos: anillo de 5 átomos de carbono.												
9	Crear ciclos: anillo de benceno.												
10	Crear ciclos: anillo de 6 átomos de carbono.												
11	Crear ciclos: anillo de 7 átomos de carbono.												
12	Crear ciclos: anillo de 8 átomos de carbono.												
13	Permite dibujar grupos funcionales pregenerados., por ejemplo: nitro, éster, etc.												
14	Menú desplegable de herramienta copiar y pega de códigos disponibles en interfaz												

Tabla N° 3. (Continuación).

C	Seleccione un átomo específico: carbono.
N	Seleccione un átomo específico: nitrógeno.
O	Seleccione un átomo específico: oxígeno.
S	Seleccione un átomo específico: azufre.
F	Seleccione un átomo específico: flúor.
Cl	Seleccione un átomo específico: cloro.
Br	Seleccione un átomo específico: bromo.
I	Seleccione un átomo específico: iodo.
P	Seleccione un átomo específico: fosforo.
X	Presione "X" para ingresar el átomo: tipo no listado.

- Herramienta buscar:

Dispone de un sistema de búsqueda que facilita la creación de diversos esqueletos de estructuras químicas. Cuando se conoce el nombre de la estructura de interés, esta herramienta resulta ser de mucha utilidad. Al seleccionar esta opción aparece una ventana flotante donde puede escribir el nombre parcial o completo del grupo del compuesto deseado (Figura N° 14). A medida que va escribiendo el nombre, el número de opciones se va restringiendo. Si hace click sobre uno de los nombres de los grupos encontrados, su esqueleto se representará automáticamente en el applet JME con los carbonos numerados de acuerdo a normas IUPAC. Si el esqueleto no se encuentra definido en la aplicación, se puede generar a partir de las subestructuras, átomos y enlaces que aparecen en la paleta del applet. Una manera de acelerar el proceso consiste en buscar un esqueleto similar y aprovechar alguna parte común. Si se desconoce el nombre y la familia del compuesto de interés, esta herramienta posee un menú despegable donde aparecen clasificados por grupo y tipo todos los esqueletos prediseñados en la aplicación. Si se desconoce el nombre, pero se conoce la

familia y sus características estructurales, en la página de inicio del editor JME-X se encuentra un menú desplegable donde aparecen clasificados por familia, grupo y tipo. A su vez, dentro de cada tipo se encuentran clasificados según características estructurales, como nombre sistemático del sistema policíclico o por el número y tamaño de anillos. (7)

The screenshot displays the search interface of the JME-X editor. It is divided into two main sections: 'Búsqueda por nombre' (Search by name) and 'Búsqueda por ciclos' (Search by cycles). The 'Búsqueda por nombre' section includes a text input field, a button labeled 'Mostrar esqueletos de la búsqueda' (Show skeletons of the search), and a note '(limitado a 100 esqueletos)' (limited to 100 skeletons). The 'Búsqueda por ciclos' section features two dropdown menus for 'Tipo' (Type) and 'Grupo' (Group), both currently set to '<--Seleccione un tipo-->' and '<--Seleccione un grupo-->' respectively. Below these sections, the results are displayed as 'Resultados: 1886 Esqueletos' (Results: 1886 Skeletons). A list of chemical names is shown, including Camphanes, Caranes, gluco-1-Cyclocitrals, Cycloheptanes-1, gluco-10-Camphanes, Cyclocitrals, gluco-9-Cyclocitrals, and Cycloheptanes-2.

Figura N° 14. Búsqueda de esqueletos por nombre.

- Menú de opciones:

Cuando se ha generado la estructura de interés este menú ofrece 3 funciones, la primera de ellas "EST→TEXT" convierte toda la información estructural en código SMILES, JME y además muestra la numeración y tipos de carbono. La función "TEXT→EST" convierte los códigos SMILES y JME en sus estructuras correspondientes y la función "Coordenadas" despliega una ventana con las coordenadas X e Y de cada átomo de la molécula, además de indicar el número de átomos y enlaces en la primera línea y la tabla de conectividad al final.

- Menú de numeración:

Consiste en un sistema de numeración automatizado para las cadenas que se añaden sobre los esqueletos creados. Dispone de dos botones para numerar las

cadena, con letras y con primas. Si se selecciona la opción con letras, las cadenas se numeran multiplicando por mil el número del carbono del que nacen y se le suma uno correlativamente. Por ejemplo, para numerar una cadena que nace del carbono 5 del esqueleto, se le asignan los números 5001, 5002 que equivalen a 5a, 5b. Si el sustituyente es un azúcar u otra agrupación establecida en los productos naturales, en lugar de numerarlos con letras, se numerarán con la opción primas. (7)

- Menú de numeración manual:

Permite introducir valores de numeración manualmente a cualquier átomo de la estructura, además de poseer un menú desplegable con las familias de compuestos con numeraciones especiales incorporadas en el applet JME.

- Menú de acciones:

La opción duplicar genera una copia en una ventana emergente de la molécula ya diseñada, lo que permite editar la estructura inicial y más adelante poder regenerarla si así se desea. Una vez generada la estructura completa, se pulsa el botón "Verificar" para comprobar que los códigos JME, SMILES y la numeración sean correctas y así, evitar errores en las estructuras. Si alguno de los átomos de carbono no está numerado o su numeración está repetida, el applet no le permite copiar la información molecular hasta que el error no sea subsanado. Adicionalmente posee botones cuya activación proporciona los códigos JME, SMILES y el tipo de cada uno de los carbonos de la molécula junto al número que le corresponde de acuerdo a normas IUPAC.

### **3.5. PLANTILLA EXCEL**

Una vez que se ha generado una estructura y se ha verificado que la numeración es correcta, toda la información referente a esa estructura se traslada a un

documento Excel en un formato predefinido (Figura N° 15). Se introduce un código interno, la referencia bibliográfica de donde procede, el nombre del compuesto y los desplazamientos químicos de cada uno de los átomos de carbono.

Toda la información que se genera en el editor JME-X (código SMILES, JME y tipo de carbono) para cada compuesto debe ser trasladada a la plantilla Excel después de haber pulsado el botón "Verificar". A partir de esa información NAPROC-13 es capaz de generar la estructura 2D y su espectro de RMN  $^{13}\text{C}$ . (7) La plantilla tiene definidos los siguientes campos:

- Referencia:

Se indica con las dos o tres primeras letras de la revista (*Phytochemistry*: ph; *Journal of Natural Products*: np; *Helvetica Chemical Acta*: hca), el año y el número de página de la publicación separados por guiones bajos.

- Estado:

Indica la confianza de la asignación de los datos  $^{13}\text{C}$  RMN: asignación mediante bidimensionales., asignaciones antiguas y asignación basada en otros compuestos con asignaciones fiables. Si no se indica ningún número, la estructura se carga en la base de datos NAPROC-13, pero queda oculta para los usuarios, excepto para el administrador.

- Nombre y nombre semisistemático:

El nombre se refiere al nombre vulgar o común del compuesto. El nombre semisistemático normalmente incorpora el nombre del grupo al que pertenece e indica la presencia de agrupaciones según lo establecido por las normas IUPAC.

- Clasificación del metabolito secundario:

Se clasifican en familia, grupo y tipo de metabolito secundario.

- Bibliografía:

Se introduce en el formato definido en la aplicación EndNote (Clement, J.A., Li, M., Hecht, S.M., Kingston, D.G. *J Nat Prod* (2006) 69, 373-6. DOI).

- SMILES numeración, JME numeración y tipo de carbono:

Se toma de la aplicación JME, una vez dibujada la estructura.

- Desplazamientos químicos en ppm:

Es toda la información RMN <sup>13</sup>C del compuesto que se encuentra dentro de la publicación, se debe verificar que corresponden con los números establecidos tanto en la publicación como en la generada por el editor JME-X.

- Disolvente deuterado utilizado en RMN:

Se indica mediante una letra mayúscula. Si se ha realizado en una mezcla de disolventes se indican las letras correspondientes con un signo (+) intercalado: C+M (sin espacios).

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O
1	referencia	Estado	nombre	nombreSem	familia	Grupo	Tipo	bibliografía	SMILES	JME	numeracion	tipoCarbono	desplazamie	disolvente	Comentarios
2															
3	FILA ESPECI	1	alpha	beta	gamma	epsilon								[Autor]	[E-mail]
4							psi								[Organismo]
5			α	β	γ	δ	ξ	±							
6															
7															
8															
9															
10															

Figura N° 15. Formato de plantilla Excel vacía.

**CAPITULO IV**  
**DISEÑO METODOLOGICO**

## IV. DISEÑO METODOLOGICO

### 4.1. TIPO DE ESTUDIO EXPERIMENTAL

Este estudio de investigación fue de tipo experimental, ya que se aplicaron herramientas quimioinformáticas y técnicas teóricocomputacionales con el principal objetivo de resolver un problema práctico, desarrollando un conjunto de información que se incorporó en una base de datos de carácter internacional para favorecer los procesos de desreplicación de mezclas de PN.

### 4.2. INVESTIGACIÓN BIBLIOGRÁFICA

#### 4.2.1. Búsqueda de publicaciones científicas con datos espectroscópicos de RMN $^{13}\text{C}$ de PN salvadoreños

Se recopilaron los datos de PN de publicaciones científicas desde 1980 hasta marzo del 2022 donde aislaban y elucidaban metabolitos secundarios conocidos y novedosos a partir de la flora salvadoreña, utilizando resonancia magnética nuclear; principalmente RMN  $^{13}\text{C}$ , como técnica de elucidación de dichas estructuras moleculares y que cumplieran con los siguientes parámetros de inclusión y exclusión: incluir al menos 2 de las palabras claves definidas, presentar completos los datos de desplazamientos químicos de sus estructuras y presentar todos los experimentos de RMN 2D de los compuestos aislados. Las aplicaciones informáticas para la búsqueda bibliográfica fueron:

- PubMed.
- ResearchGate.
- Springer Link.
- Academia.edu.
- ScienceDirect: Scopus, Elsevier y Mendeley.
- Google Académico.

Además, se realizaron consultas en libros y en publicaciones de revistas científicas en las siguientes bibliotecas:

- Dr. Benjamín Orozco de la Facultad de Química y Farmacia de la Universidad de El Salvador.
- Central de la Universidad de El Salvador.

### 4.3. INVESTIGACIÓN DE CAMPO

Para las búsquedas se emplearon las siguientes palabras claves “Natural Products”, “C NMR”, “Núñez”, “Torres-Romero”, “Bazzocchi” y “El Salvador”, posterior a ello, se realizó un proceso de inclusión y exclusión bajo los siguientes parámetros: incluir al menos 2 de las palabras claves definidas, presentar completos los datos de desplazamientos químicos de sus estructuras y presentar todos los experimentos de RMN 2D de los compuestos aislados. Las publicaciones fueron clasificadas en grupos, según la Familia botánica de la especie vegetal en que se describe el metabolito secundario aislado.

Por ejemplo, se realizó una búsqueda en el sitio ScienceDirect utilizando las palabras claves “El Salvador” “Natural Product” y “C RMN”, y se encontró el artículo Ardiles, A. E., González-Rodríguez, G., Núñez, M. J., Perestelo, N. R., Pardo, V., Jiménez, I. A., Valverde, N. M., & Bazzocchi, I. L. (2012). Estudios de triterpenos del friedelano de origen natural como sensibilizadores de la insulina en el tratamiento de la diabetes mellitus tipo 2. *Phytochemistry*, 84, 116–124 (Figura N° 16), que será utilizado para explicar toda la metodología de este trabajo de grado, específicamente el procesamiento del **compuesto triterpénico 7**: 3 $\beta$ ,24-epoxy-2 $\alpha$ ,3 $\alpha$ -dihydroxy-D:A-friedooleanan-29-oic acid methyl ester (Tabla N° 4) aislado en la especie *Celastrus vulcanicola* de la Familia Celastraceae.

The screenshot shows the ScienceDirect interface for the article "Studies of naturally occurring friedelane triterpenoids as insulin sensitizers in the treatment type 2 diabetes mellitus" in the journal *Phytochemistry*, Volume 84, December 2012, Pages 116-124. The article is authored by Alejandro E. Ardiles, Águeda González-Rodríguez, Marvin J. Núñez, Nayra R. Perestalo, Virginia Pardo, Ignacio A. Jiménez, Ángela M. Valverde, Isabel L. Bazzocchi, and R. B. The abstract describes the isolation and structural elucidation of nine friedelane-type triterpenes (1-9) and twenty-two known ones (10-31) from the root barks of *Celastrus vulcanicola* and *Maytenus jelskii*. It notes that compounds 1 and 3 showed increased insulin-mediated signaling, suggesting potential therapeutic use in insulin-resistant states. The page includes sections for Outline, Abstract, Keywords, Figures (6), Tables (2), Extras (1), Recommended articles, and Article Metrics (Citations: 26, Captures: 5 Exports-Saves, 79 Readers).

Figura N° 16. Artículo clave: ph84\_116, alojado en ScienceDirect.

#### 4.3.1. Extracción de los datos RMN <sup>13</sup>C de las publicaciones científicas

Toda la información estructural y espectroscópica contenida en las publicaciones científicas seleccionadas, fue recopilada en tablas Word haciendo uso de la licencia de Acrobat Pro DC, al igual que el editor de texto y código fuente Sublime Text para extraer los datos de desplazamientos químicos RMN <sup>13</sup>C, su estructura e información propia de cada metabolito secundario aislado. Posteriormente, se exportó la información procesada de cada estructura con la aplicación JME-X a una plantilla predeterminada en formato Excel para ser posteriormente incluida en la base de datos de la aplicación NAPROC-13. Por ejemplo, en la Tabla N° 4 se muestra toda la información recuperada del **compuesto triterpénico 7**. Estas fichas fueron realizadas en el idioma inglés, ya que la plataforma NAPROC-13 exige que esta información se introduzca en ese idioma.

Tabla N° 4. Información recuperada del **compuesto triterpénico 7**.

Nombre trivial:		-----		
Nombre Semisintético:		3 $\beta$ ,24-epoxy-2 $\alpha$ ,3 $\alpha$ -dihydroxy-D:A-friedooleanan-29-oic acid methyl ester		
C	<sup>13</sup> C RMN (150 MHz, $\delta$ , CDCl <sub>3</sub> )	Tipo de Carbono		Estructura Artículo
1	26.7	t	CH <sub>2</sub>	
2	73.2	d	CH	
3	106.8	s	C	
4	45.7	d	CH	
5	47	s	C	
6	33.6	t	CH <sub>2</sub>	
7	19.2	t	CH <sub>2</sub>	
8	49.7	d	CH	
9	37	s	C	
10	52.6	d	CH	
11	34.1	t	CH <sub>2</sub>	
12	29	t	CH <sub>2</sub>	
13	39.1	s	C	
14	49.1	s	C	
15	29	t	CH <sub>2</sub>	
16	36.2	t	CH <sub>2</sub>	
17	30.1	s	C	
18	44.5	d	CH	
19	30.4	t	CH <sub>2</sub>	
20	40.5	s	C	
21	30	t	CH <sub>2</sub>	
22	36.4	t	CH <sub>2</sub>	
23	6.9	q	CH <sub>3</sub>	
24	72.2	t	CH <sub>2</sub>	
25	16.7	q	CH <sub>3</sub>	
26	16.1	q	CH <sub>3</sub>	
27	17.4	q	CH <sub>3</sub>	

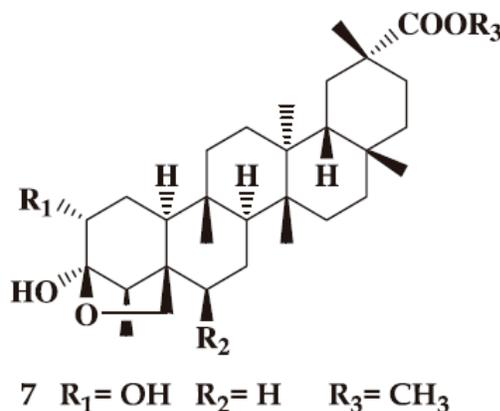


Tabla N° 4. (Continuación).

C	<sup>13</sup> C RMN (150 MHz, δ, CDCl <sub>3</sub> )	Tipo de Carbono		Estructura Artículo
28	31.8	q	CH <sub>3</sub>	
29	179.1	s	C	
30	32	q	CH <sub>3</sub>	
1'	51.6	q	CH <sub>3</sub>	

#### 4.4. PARTE EXPERIMENTAL

Se presenta un ejemplo de cómo se realizó el procesamiento de cada metabolito secundario obtenido. En el artículo: estudios de triterpenos del friedelano de origen natural como sensibilizadores de la insulina en el tratamiento de la diabetes mellitus tipo 2 (Figura N° 16), se encontró el **compuesto triterpénico 7**: 3β,24-epoxy-2α,3α-dihydroxy-D:A-friedooleanan-29-oic acid methyl ester aislado de la especie *C. vulcanicola* de la Familia Celastraceae. Su procesamiento es el siguiente:

- 4.4.1. Generar estructuras electrónicas de los productos naturales asociadas a los datos de desplazamiento químico

Dado que el código SMILES y JME para cada compuesto no está disponible en las publicaciones, se utilizó el editor de moléculas JME-X para generar dichos códigos para cada metabolito secundario encontrado en la búsqueda bibliográfica. En la Figura N° 17, se muestra el procesamiento del **compuesto triterpénico 7**: en la parte superior izquierda se representa la estructura química del compuesto; a partir de la estructura se generan los códigos SMILES y JME que aparecen en la parte inferior izquierda, en la celda vertical de la derecha se genera el tipo de carbono y su numeración correspondiente. En la Tabla N° 5 se muestra el código SMILES y JME generado por la aplicación.

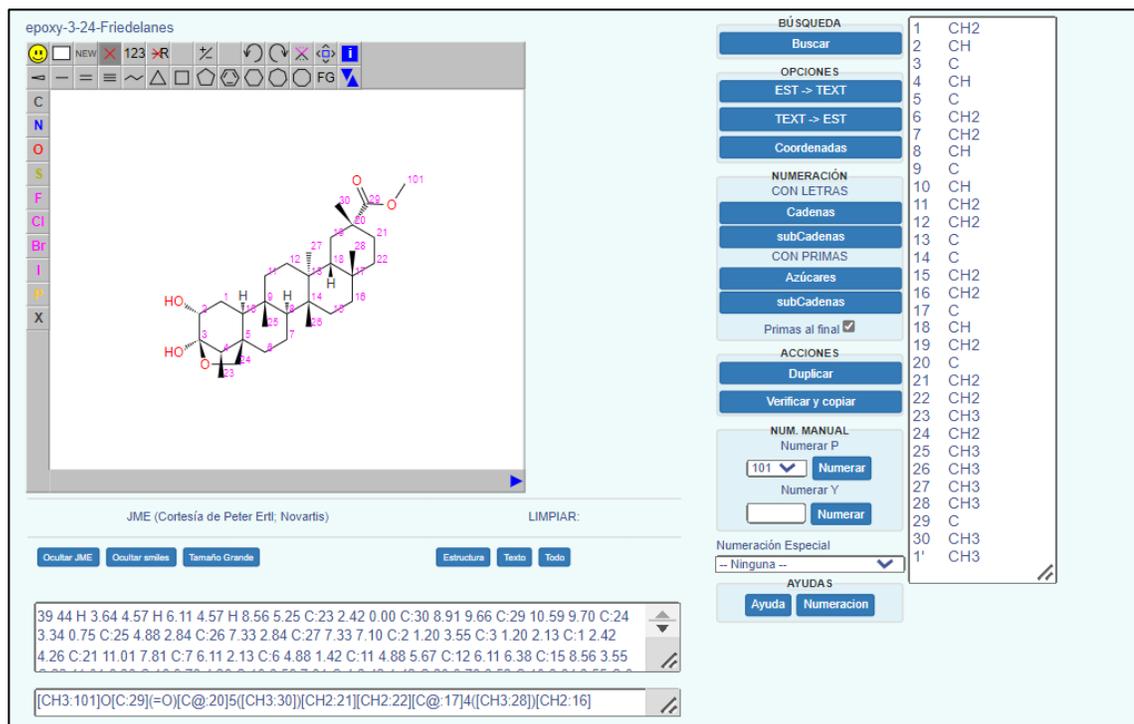


Figura N° 17. Procesamiento del **compuesto triterpénico 7**.

Tabla N° 5. Código SMILES y JME del **compuesto triterpénico 7**.

<b>Código SMILES:</b>	[CH3:101]O[C:29](=O)[C@:20]5([CH3:30])[CH2:21][CH2:22][C@:17]4([CH3:28])[CH2:16][CH2:15][C@:14]3([CH3:26])[CH:8]2[CH2:7][CH2:6][C@:@:5]16[CH2:24]O[C@:@:3](O)([C@H:2](O)[CH2:1][CH:10]1[C@:9]2([CH3:25])[CH2:11][CH2:12][C@:@:13]3([CH3:27])[CH:18]4[CH2:19]5)[C@@H:4]6[CH3:23]
<b>Código JME:</b>	39 44 H 3.64 4.57 H 6.11 4.57 H 8.56 5.25 C:23 2.42 0.00 C:30 8.91 9.66 C:29 10.59 9.70 C:25 4.88 2.84 C:26 7.33 2.84 C:27 7.33 7.10 C:2 1.20 3.55 C:3 1.20 2.13 C:1 2.42 4.26 C:21 11.01 7.81 C:7 6.11 2.13 C:6 4.88 1.42 C:11 4.88 5.67 C:12 6.11 6.38 C:15 8.56 3.55 C:22 11.01 6.38 C:16 9.78 4.26 C:19 8.56 7.81 C:4 2.42 1.42 C:20 9.78 8.52 C:10 3.64 3.55 C:8 6.11 3.55 C:18 8.56 6.38 C:5 3.64 2.13 C:9 4.88 4.26 C:14 7.33 4.26 C:13 7.33 5.67 C:17 9.78 5.67 O 10.01 10.96 C:28 9.78 7.07 O 0.00 4.26 O 0.00 1.44 O 11.97 9.64 C:101 12.73 10.81 C:24 3.64 0.73 O 1.20 0.73 24 1 -2 25 2 -2 26 3 -1 22 4 -1 23 5 -1 23 6 -2 28 7 -1 29 8 -1 30 9 -2 10 11 1 10 12 1 11 22 1 12 24 1 13 19 1 13 23 1 14 15 1 14 25 1 15 27 1 16 17 1 16 28 1 17 30 1 18 20 1 18 29 1 19 31 1 20 31 1 21 23 1 21 26 1 22 27 1 24 27 1 24 28 1 25 28 1 25 29 1 26 30 1 26 31 1 29 30 1 6 32 2 31 33 -1

Tabla N° 5. (Continuación).

<b>Código</b>	10 34 -2 11 35 -2 6 36 1 36 37 1 27 38 -1 11 39 -1 39 38 1
<b>JME:</b>	

El orden que se siguió para generar rápidamente las estructuras fue siguiente:

- Generación del esqueleto base del compuesto:

Siempre que fue posible se utilizaron los esqueletos disponibles en la aplicación. Si el esqueleto no se encontraba definido en la biblioteca integrada en el editor, se generó a partir de las subestructuras, átomos y enlaces que aparecen en la paleta de edición del applet JME-X. Para el **compuesto triterpénico 7** se hizo una búsqueda por esqueletos, ya que se conocía por la estructura química que este metabolito secundario pertenece a la familia de los triterpenos de la serie del friedelano. Se introdujo este último criterio para mostrar todas las opciones disponibles en la aplicación JME-X, eligiendo aquel esqueleto que más se acercaba a la estructura de interés. Para este caso se seleccionó el epoxy-3-24-friedelanes (Figura N° 18).

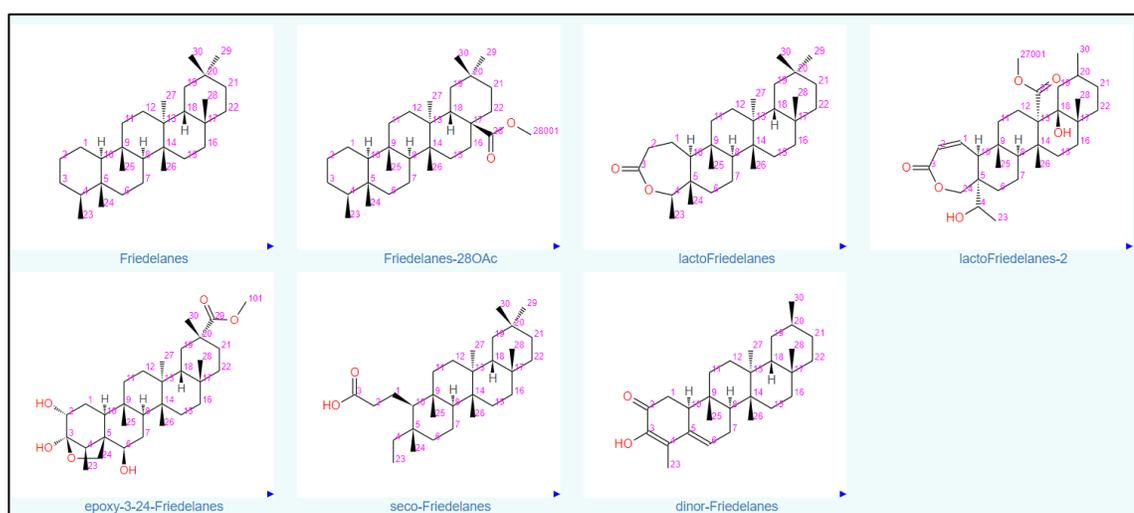


Figura N° 18. Estructuras de esqueletos disponibles para triterpenos de la serie del friedelano.

- Numeración (x= 1-100) del esqueleto:

Se utilizó esta numeración solamente cuando el esqueleto no se encontraba en JME-X, ya que las opciones disponibles cuentan con numeración predefinida siguiendo las reglas IUPAC. En el caso del **compuesto triterpénico 7**, la selección del esqueleto epoxy-3-24-friedelanes al estar ya en JME-X, no necesitó numeración adicional ya que la estructura base del compuesto en la publicación concuerda con el de la plataforma (Figura N° 19).

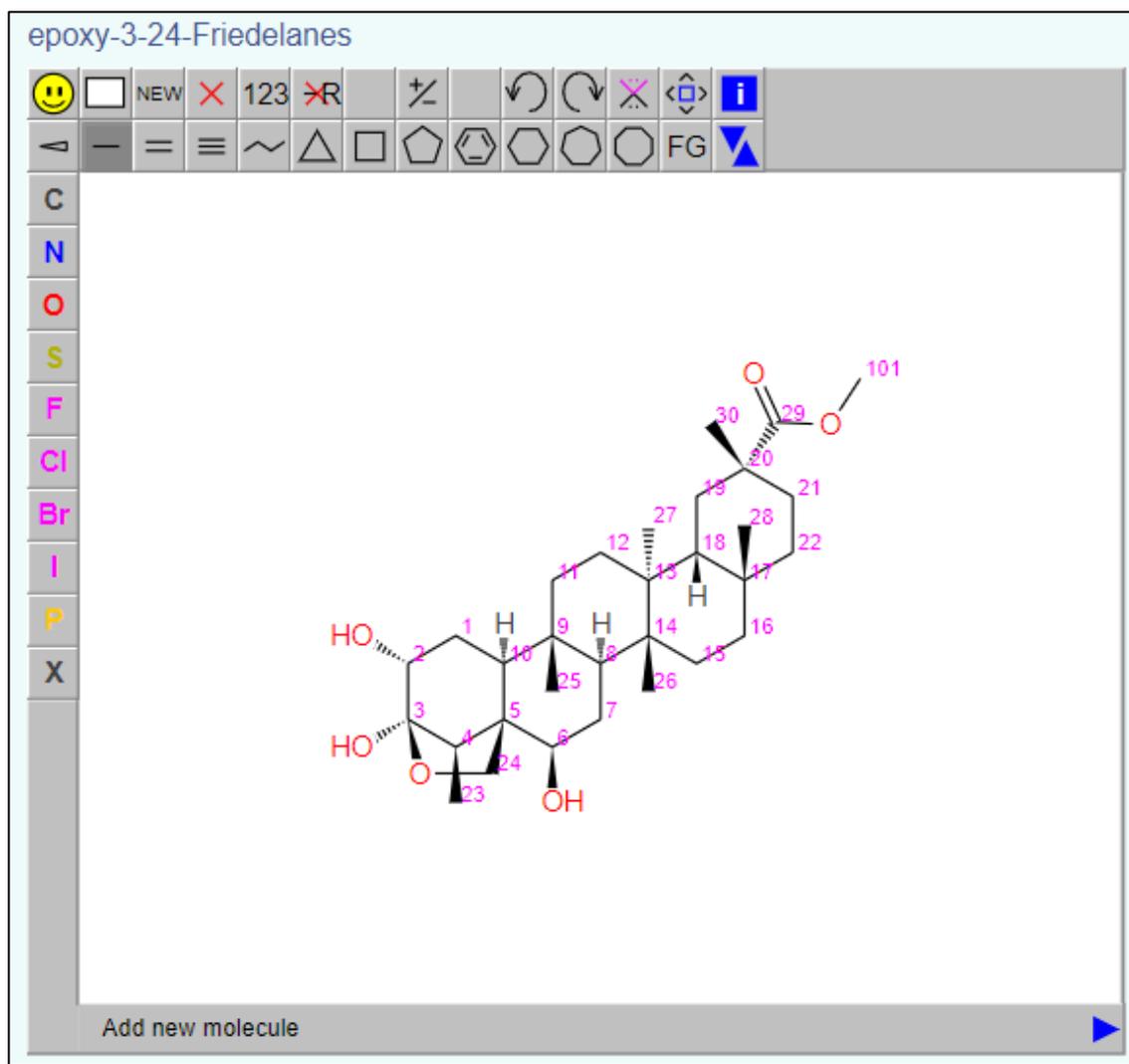


Figura N° 19. Esqueleto epoxy-3-24-friedelanes.

- Introducción de cadenas y funciones:

Se agregaron las cadenas y demás sustituyentes específicos de la estructura que no se encontraban en el esqueleto base y se eliminaron aquellos que no sean necesarios.

Las sub-cadenas no se dibujaron hasta después de asignar la numeración de las cadenas siguiendo reglas IUPAC. El **compuesto triterpénico 7** presenta tres sustituyentes: un OH en R<sub>1</sub>, un H en R<sub>2</sub> y CH<sub>3</sub> en R<sub>3</sub>. El esqueleto epoxy-3-24-friedelanes ya cuenta con un OH en R<sub>1</sub> y un CH<sub>3</sub> en R<sub>3</sub>, por lo tanto, solo se eliminó el OH en el carbono número 6 que corresponde a R<sub>2</sub>.

- Numeración de cadenas y funciones (100x o 10x):

Se numeraron las cadenas y demás sustituyentes específicos de la estructura incorporados en el esqueleto base. Para numerar automáticamente las cadenas se tomaron en cuenta las siguientes consideraciones: no debe de estar indicada la estereoquímica en el carbono de partida; si es un ciclo debe de romperse el enlace entre el primer y el último carbono; no puede haber insaturaciones y no puede haber sub-cadenas sobre la cadena a numerar.

- Introducción de sub-cadenas:

Se introdujeron sub-cadenas sobre aquel carbono base del esqueleto del cual parte; éste debió de estar numerado. Se dibujaron tomando en cuenta los enlaces octogonales, para que estos no quedaran inclinados y procurando que no se superpongan ni se aproximen a otras cadenas, para poder visualizar correctamente la numeración durante la representación cuando se realice una búsqueda en NAPROC-13.

- Numeración de sub-cadenas:

Para numerar las sub-cadenas, se tomaron en cuenta las mismas recomendaciones que para la numeración de las cadenas.

- Definición de la estereoquímica:

Los estereocentros se definieron con cuñas, así las densas, indican disposición beta; las cuñas a rayas indican disposición alfa. Las cuñas indican solamente la configuración del átomo al que se encuentran unidas por el lado estrecho de la cuña.

#### 4.4.2. Completar plantillas Excel

Las partes de la plantilla Excel aparecen definidas en el apartado 3.5. El orden de llenado de las plantillas Excel para cada estructura que se utilizó es el siguiente:

- Referencia.
- Estado.
- Nombre.
- Nombre semisistemático.
- Clasificación del metabolito secundario.
- Bibliografía.
- Numeración SMILES.
- Numeración JME.
- Tipo de carbono.
- Desplazamientos químicos en ppm.
- Disolvente deuterado utilizado en RMN.
- Comentarios.

#### 4.4.3. Importación y verificación de la información estructural, bibliográfica y espectroscópica en NAPROC-13

Toda la información utilizada para completar la plantilla Excel fue introducida en la base de datos con su respectiva referencia bibliográfica haciendo uso de un formato definido en la aplicación EndNote. NAPROC-13 dispone de un sistema de verificación, de manera que va comparando cada una de las estructuras que se incorporan con las disponibles en la base de datos, descartando todas aquellas estructuras introducidas previamente por otros colaboradores, siempre y cuando el disolvente en el que haya sido registrado el espectro sea el mismo. Visualmente se verificó cada una de las moléculas procesadas para corroborar que las estructuras se encontraban correctamente dibujadas y que los desplazamientos químicos en ppm característicos correspondían a cada átomo. La Figura N° 20 muestra la plantilla Excel completa para el **compuesto triterpénico 7**: extraído del artículo: estudios de triterpenos del friedelano de origen natural como sensibilizadores de la insulina en el tratamiento de la diabetes mellitus tipo 2. *Phytochemistry*. 2012;84:116–24.

referencia	Estado	nombre	nombreSemi familia	Grupo	Tipo	bibliografia	SMILES	JME	numeracion	tipoCarbono	desplazamiento	disolvente	Comentarios	Comentarios
1														
2														
3	FILA ESPECIA	1		Terpenoids	Triterpenoids	Friedelanes							Josué Isaac : <a href="mailto:jp14001@ue">jp14001@ue</a>	Universidad (El Salvador
4		alpha	beta	gamma	epsilon									
5		α	β	γ	δ	ξ								
6														
7														
8	ph84_116_7			3β,24-Epoxy-2α,3α-dihydroxy-D-A-friedooleanan-29-oic acid methyl ester			[CH3:101]O[39 44 H 3.61			1 CH2 2 CH 3 C 4 CH 5 C 6 CH2 7 CH2 8 CH 9 C 10 CH 11 CH2 12 CH2 13 C 14 C 15 CH2 16 CH2 17 C 18 CH 19 CH2 20 C 21 CH2 22 CH2 23 CH3 24 CH2 25 CH3 26 CH3 27 CH3 28 CH3 29 C 30 CH3 CH3	25.9 C 75.4 105.6 47.4 46.8 33.3 19.2 49.8 37.1 53.2 34.3 29 39.2 39.1 29.1 36.2 30.1 44.5 30.4 40.6 30 36.6 7.1 72.4 16.7 16.2 17.5 31.9 179.4 32.1 51.6			
9														
10														
11														
12														
13														
14														
15														
16														
17														
18														
19														
20														
21														
22														
23														
24														
25														
26														
27														
28														
29														
30														
31														
32														
33														
34														
35														
36														
37														
38														
39														
40														

Figura N° 20. Plantilla Excel completa para el **compuesto triterpénico 7**: 3β,24-epoxy-2α,3α-dihydroxy-D:A-friedooleanan-29-oic acid methyl ester, extraído del artículo: estudios de triterpenos del friedelano de origen natural como sensibilizadores de la insulina en el tratamiento de la diabetes mellitus tipo 2. *Phytochemistry*. 2012;84:116–24.

**CAPITULO V**  
**RESULTADOS Y DISCUSION DE RESULTADOS**

## V. RESULTADOS Y DISCUSION DE RESULTADOS

### 5.1. PUBLICACIONES CIENTÍFICAS ENCONTRADAS

El proceso de búsqueda de artículos científicos (fundamental en el desarrollo de esta investigación) se realizó en diferentes colecciones y fuentes bibliográficas de literatura: PubMed, ResearchGate, Springer Link, Academia.edu, ScienceDirect (Scopus, Elsevier y Mendeley), Google Académico y las proporcionadas por la Universidad de El Salvador a través de la Biblioteca Dr. Benjamín Orozco de la Facultad de Química y Farmacia y de su Biblioteca Central. La identificación de potenciales artículos elegibles fue realizada de forma operativa, tomando en cuenta la estructura particular de cada aplicación informática de reservorio de artículos, ya que utilizan criterios de indexación y palabras claves más o menos específicas. A continuación, se presentan los resultados derivados de la búsqueda de artículos científicos bajo los criterios establecidos en el apartado 4.3 del diseño metodológico de esta investigación.

#### 5.1.1. Palabras claves

En primer lugar, se realizó una búsqueda de las publicaciones científicas utilizando palabras claves de uso común en la investigación de productos naturales, determinadas para la búsqueda apropiada bajo la primicia del aislamiento e identificación de metabolitos secundarios de flora salvadoreña, utilizando RMN  $^{13}\text{C}$  como técnica principal de elucidación de estructuras moleculares en las diferentes aplicaciones informáticas de reservorio de artículos. Estas palabras claves fueron seleccionadas en base a los términos de común aplicación en los artículos y revistas científicas, así como también los apellidos de los principales investigadores en el país. De acuerdo a los 44 artículos encontrados, se determinó la incidencia de las palabras, siendo “C NMR” (386), “Bazzocchi” (193) y “El Salvador” (206) las más utilizadas en las

publicaciones. La incidencia del resto de palabras clave se refleja en la Tabla N° 6. En la Figura N° 21, se muestra gráficamente el conjunto de datos obtenidos en los 44 artículos encontrados.

Tabla N° 6. Incidencia de palabras claves.

PALABRA CLAVE	INCIDENCIA TOTAL
Bazzocchi	193
El Salvador	206
C NMR	386
Natural Products	163
Núñez	40
Torres-Romero	61

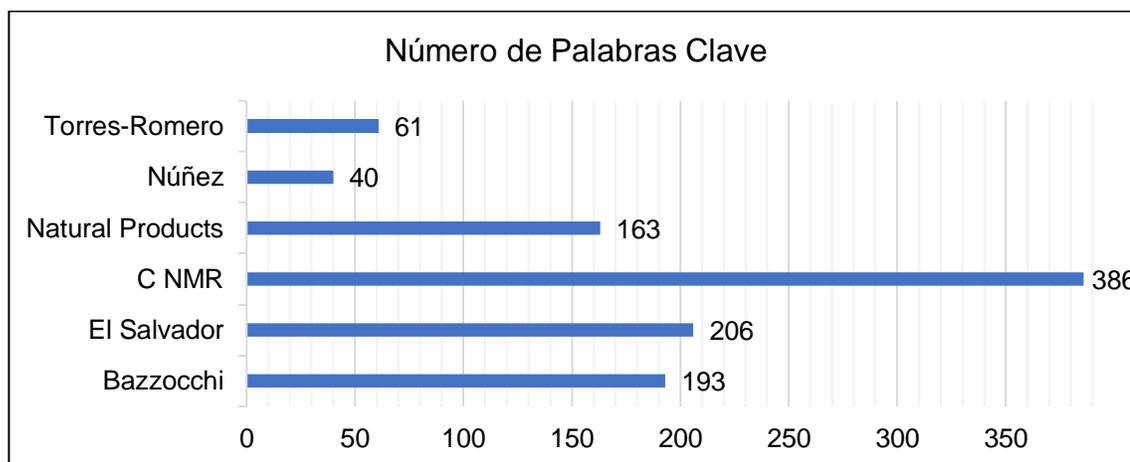


Figura N° 21. Número de palabras claves obtenidas en los artículos científicos

### 5.1.2. Criterios de inclusión y exclusión

En una segunda fase, los artículos encontrados se sometieron a un análisis de contenido, a fin de realizar una selección o cribado de los potenciales artículos a procesarse. Se diseñó para ello un diagrama del proceso de inclusión y exclusión de artículos (Figura N° 22) con criterios explícitos y comprensibles. Se recopilamos artículos que su publicación estuvo comprendida entre los años 1980 a marzo del 2022, relacionados con el aislamiento e identificación de metabolitos secundarios

de la flora salvadoreña, utilizando espectroscopia RMN  $^{13}\text{C}$  como técnica de elucidación de estructuras y se excluyeron aquellos artículos donde no presentaban datos de desplazamiento químicos de RMN  $^{13}\text{C}$  o no los presentaba en su totalidad; además, se excluyeron aquellos que no contenían las estructuras propuestas en la publicación.

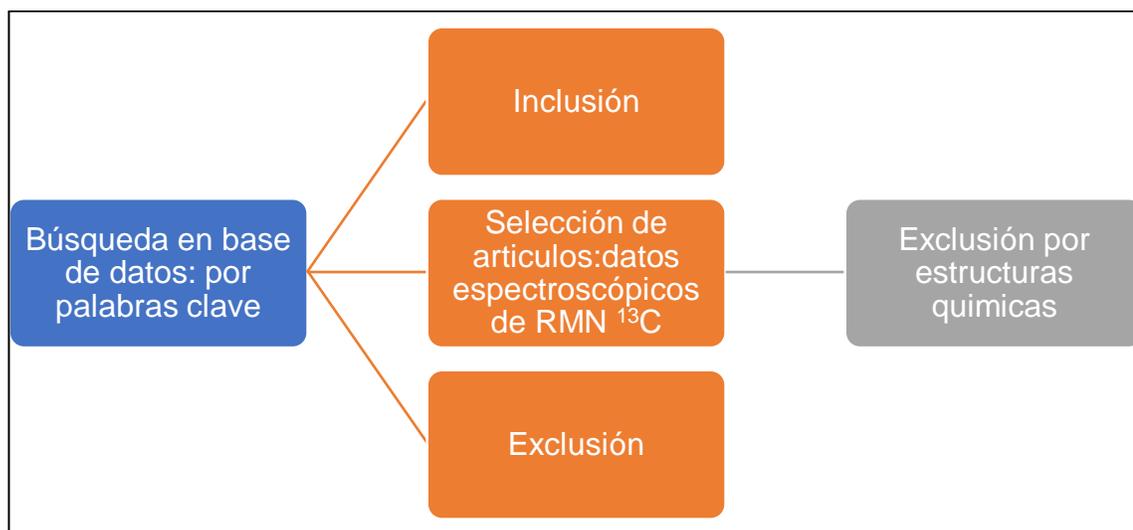


Figura N° 22. Diagrama del proceso de inclusión y exclusión.

En primera instancia se recopilaron 44 artículos basados en la búsqueda por palabras clave, de los cuales 34 cumplieron con los criterios establecidos en la exclusión bajo el parámetro de datos espectroscópicos de RMN  $^{13}\text{C}$ , seguido de una exclusión basada en estructuras químicas, dejando 25 artículos aptos para procesarse con la herramienta quimioinformática JME-X.

## 5.2. EXTRACCIÓN DE DATOS DE ARTÍCULOS SELECCIONADOS: CREACIÓN DE FICHAS SISTEMÁTICAS

Se realizó la compilación de la información de los 25 artículos seleccionados que cumplieron con todos los parámetros de inclusión y exclusión, mostrando al detalle su contenido en fichas de revisión sistemática.

La información a incluir fue procesada con la aplicación OneNote respetando el formato establecido en NAPROC-13. Estas fichas fueron creadas para cada publicación, organizando de manera clara los datos de interés: autor o autores, revista de publicación, año, volumen, páginas, DOI, especie vegetal estudiada y clave interna de la publicación. Fueron realizadas en el idioma inglés, ya que la plataforma NAPROC-13 exige que esta información se introduzca en ese idioma. La clasificación inicial de los artículos fue en base a la familia botánica de las especies vegetales estudiadas: Lamiaceae, Asteraceae, Solanaceae, Piperaceae y Celastraceae. A continuación, se detallan las fichas creadas para los artículos científicos, distribuidos por familia botánica de la flora salvadoreña.

#### 5.2.1. Artículo seleccionado, familia: Lamiaceae

Tabla N° 7. Ficha de artículo seleccionado: familia Lamiaceae.

CLAVE	ARTÍCULO	ESPECIE VEGETAL
z06_165	Grassi, P., Reyes, T.S.U., Sosa, S., Tubaro, A., Hofer, O., Zitterl-Eglseer, K. <i>Z Naturforsch, C: Biosci</i> (2006) 61, 165-70 DOI: <a href="https://doi.org/10.1515/znc-2006-3-402">https://doi.org/10.1515/znc-2006-3-402</a>	<i>Hyptis suaveolens</i>

#### 5.2.2. Artículo seleccionado, familia: Solanaceae

Tabla N° 8. Ficha de artículo seleccionado: familia Solanaceae.

CLAVE	ARTÍCULO	ESPECIE VEGETAL
np21_2717	Taddeo, V.A., Núñez, M.J., Beltran, M., Castillo, U.G., Menjivar, J., Jiménez, I.A., Alcami, J., Bedoya, L.M., Bazzocchi, I.L. <i>J Nat Prod</i> (2021) 84, 2717-26 DOI: <a href="http://dx.doi.org/10.1021/acs.jnatprod.1c00637">http://dx.doi.org/10.1021/acs.jnatprod.1c00637</a>	<i>Physalis nicandroides</i>

## 5.2.3. Artículos seleccionados, familia: Asteraceae

Tabla N° 9. Ficha de artículos seleccionados: familia Asteraceae.

CLAVE	ARTÍCULOS	ESPECIE VEGETAL
ph157_145	Gogineni, V., Nael, M.A., León, F., Nuñez, M.J., Cutler, S.J. <i>Phytochemistry</i> (2019) 157, 145-50. DOI: <a href="http://dx.doi.org/10.1016/j.phytochem.2018.10.022">http://dx.doi.org/10.1016/j.phytochem.2018.10.022</a>	<i>Calea urticifolia</i>
ph65_3107	Yamada, M., Matsuura, N., Suzuki, H., Kurosaka, C., Hasegawa, N., Ubukata, M., Tanaka, T., Inuma, M. <i>Phytochemistry</i> (2004) 65, 3107-11. DOI: <a href="https://doi.org/10.1016/j.phytochem.2004.08.040">https://doi.org/10.1016/j.phytochem.2004.08.040</a>	<i>Calea urticifolia</i>

## 5.2.4. Artículo seleccionado, familia: Piperaceae

Tabla N° 10. Ficha de artículo seleccionado: familia Piperaceae,

CLAVE	ARTÍCULO	ESPECIE VEGETAL
np22_259	Castillo, U.G., Komatsu, A., Martínez, M.L., Menjivar, J., Núñez, M.J., Uekusa, Y., Narukawa, Y., Kiuchi, F., Nakajima-Shimada, J. <i>J Nat Med</i> (2022) 76, 259-67 DOI: <a href="http://dx.doi.org/10.1007/s11418-021-01562-6">http://dx.doi.org/10.1007/s11418-021-01562-6</a>	<i>Piper jacquemontianum</i>

## 5.2.5. Artículos seleccionados, familia: Celastraceae

Tabla N° 11. Ficha de artículos seleccionados: familia Celastraceae.

CLAVE	ARTÍCULOS	ESPECIE VEGETAL
np04_14	Núñez, M.J., Guadano, A., Jiménez, I.A., Ravelo, A.G., González-Coloma, A., Bazzocchi, I.L. <i>J Nat Prod</i> (2004) 67, 14-8. DOI: <a href="https://doi.org/10.1021/np030347q">https://doi.org/10.1021/np030347q</a>	<i>Maytenus chiapensis</i>

Tabla N° 11. (Continuación).

CLAVE	ARTÍCULOS	ESPECIE VEGETAL
ph84_116	Ardiles, A.E., González-Rodríguez, A., Núñez, M.J., Perestelo, N.R., Pardo, V., Jiménez, I.A., Valverde, A.M., Bazzocchi, I.L. <i>Phytochemistry</i> (2012) 84, 116-24. DOI: <a href="https://doi.org/10.1016/j.phytochem.2012.07.025">https://doi.org/10.1016/j.phytochem.2012.07.025</a>	<i>Celastrus vulcanicola</i>
np15_1045	Callies, O., Bedoya, L.M., Beltrán, M., Muñoz, A., Calderón, P.O., Osorio, A.A., Jiménez, I.A., Alcamí, J., Bazzocchi, I.L. <i>J Nat Prod</i> (2015) 78, 1045-55. DOI: <a href="https://doi.org/10.1021/np501025r">https://doi.org/10.1021/np501025r</a>	<i>Cassine xylocarpa</i>
ph17_142	Callies, O., Núñez, M.J., Perestelo, N.R., Reyes, C.P., Torres-Romero, D., Jiménez, I.A., Bazzocchi, I.L. <i>Phytochemistry</i> (2017) 142, 21-9. DOI: <a href="https://doi.org/10.1016/j.phytochem.2017.06.013">https://doi.org/10.1016/j.phytochem.2017.06.013</a>	- <i>Celastrus vulcanicola</i> - <i>Maytenus segoviarum</i>
np15_736	Callies, O., Sánchez-Canete, M.P., Gamarro, F., Jiménez, I.A., Castanys, S., Bazzocchi, I.L. <i>J Nat Prod</i> (2015) 78, 736-45. DOI: <a href="https://doi.org/10.1021/np500903a">https://doi.org/10.1021/np500903a</a>	<i>Celastrus vulcanicola</i>
ej16_95	Núñez, M.J., Jiménez, I.A., Mendoza, C.R., Chavez-Sifontes, M., Martínez, M.L., Ichiishi, E., Tokuda, R., Tokuda, H., Bazzocchi, I.L. <i>Eur J Med Chem</i> (2016) 111, 95-102. DOI: <a href="https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2016.01.049">https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2016.01.049</a>	<i>Maytenus chiapensis</i>
np05_1018	Núñez, M.J., Reyes, C.P., Jiménez, I.A., Moujir, L., Bazzocchi, I.L. <i>J Nat Prod</i> (2005) 68, 1018-21. DOI: <a href="https://doi.org/10.1021/np058016w">https://doi.org/10.1021/np058016w</a>	<i>Maytenus chiapensis</i>
th104_7367	Núñez, M.J., López, M.R., Jiménez, I.A., Moujir, L.M., Ravelo, A.G., Bazzocchi, I.L. <i>Tetrahedron Lett</i> (2004) 45, 7367-70. DOI: <a href="https://doi.org/10.1016/j.tetlet.2004.07.133">https://doi.org/10.1016/j.tetlet.2004.07.133</a>	<i>Maytenus chiapensis</i>
ph72_385	Núñez, M.J., Reyes, C.P., Jiménez, I.A., Hayashi, H., Tokuda, H., Bazzocchi, I.L. <i>Phytochemistry</i> (2011) 72, 385-90. DOI: <a href="https://doi.org/10.1016/j.phytochem.2011.01.017">https://doi.org/10.1016/j.phytochem.2011.01.017</a>	<i>Crossopetalum uragoga</i>
th11_3030	Núñez, M.J., Kennedy, M.L., Jiménez, I.A., Bazzocchi, I.L. <i>Tetrahedron</i> (2011) 67, 3030-3. DOI: <a href="https://doi.org/10.1016/j.tet.2011.03.019">https://doi.org/10.1016/j.tet.2011.03.019</a>	<i>Crossopetalum uragoga</i>

Tabla N° 11. (Continuación).

CLAVE	ARTÍCULOS	ESPECIE VEGETAL
ph112_244	Núñez, M.J., Ardiles, A.E., Martínez, M.L., Torres-Romero, D., Jiménez, I.A., Bazzocchi, I.L. <i>Phytochemi Lett</i> (2012) 5, 244-8. DOI: <a href="https://doi.org/10.1016/j.phytol.2012.01.004">https://doi.org/10.1016/j.phytol.2012.01.004</a>	- <i>Celastrus vulcanicola</i> - <i>Cassine xylocarpa</i>
ph113_148	Núñez, M.J., Ardiles, A.E., Martínez, M.L., Torres-Romero, D., Jiménez, I.A., Bazzocchi, I.L. <i>Phytochem Lett</i> (2013) 6, 148-51. DOI: <a href="https://doi.org/10.1016/j.phytol.2012.12.003">https://doi.org/10.1016/j.phytol.2012.12.003</a>	- <i>Celastrus vulcanicola</i> - <i>Cassine xylocarpa</i>
np03_572	Núñez M.J., Cortes-Selva F., Bazzocchi I.L., Jiménez I.A., González A.G., Ravelo A.G., Gavin J.A. <i>J Nat Prod</i> (2003) 66, 572-4. DOI: <a href="https://doi.org/10.1021/np0205248">https://doi.org/10.1021/np0205248</a>	<i>Maytenus chiapensis</i>
ejc16_7582	Purino, M., Ardiles, A.E., Callies, O., Jiménez, I.A., Bazzocchi, I.L. <i>Chem Eur J</i> (2016) 22, 7582-91. DOI: <a href="https://doi.org/10.1002/chem.201600294">https://doi.org/10.1002/chem.201600294</a>	<i>Celastrus vulcanicola</i>
bmc06_1573	Reyes, C.P., Núñez, M.J., Jiménez, I.A., Busserolles, J., Alcaraz, M.J., Bazzocchi, I.L. <i>Bioorg Med Chem</i> (2006) 14, 1573-9. DOI: <a href="https://doi.org/10.1016/j.bmc.2005.10.063">https://doi.org/10.1016/j.bmc.2005.10.063</a>	<i>Maytenus chiapensis</i>
np08_1331	Torres-Romero, D., King-Díaz, B., Jiménez, I.A., Lotina-Hennsen, B., Bazzocchi, I.L. <i>J Nat Prod</i> (2008) 71, 1331-5. DOI: <a href="https://doi.org/10.1021/np070647y">https://doi.org/10.1021/np070647y</a>	<i>Celastrus vulcanicola</i>
bmc11_2182	Torres-Romero, D., Jiménez, I.A., Rojas, R., Gilman, R.H., López, M., Bazzocchi, I.L. <i>Bioorg Med Chem</i> (2011) 19, 2182-9. DOI: <a href="https://doi.org/10.1016/j.bmc.2011.02.034">https://doi.org/10.1016/j.bmc.2011.02.034</a>	<i>Celastrus vulcanicola</i>
ej12_295	Osorio, A.A., Muñoz, A., Torres-Romero, D., Bedoya, L.M., Perestelo, N.R., Jiménez, I.A., Alcamí, J., Bazzocchi, I.L. <i>Euro J Med Chem</i> (2012) 52, 295-303. DOI: <a href="https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2012.03.035">https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2012.03.035</a>	<i>Cassine xylocarpa</i>
obm09_5166	Torres-Romero, D., Muñoz-Martínez, F., Jiménez, I.A., Castanys, S., Gamarro, F., Bazzocchi, I.L. <i>Org Biomol Chem</i> (2009) 7, 5166-72. DOI: <a href="https://doi.org/10.1039/B915678J">https://doi.org/10.1039/B915678J</a>	<i>Celastrus vulcanicola</i>

Tabla N° 11. (Continuación).

CLAVE	ARTÍCULOS	ESPECIE VEGETAL
jmc07_4808	Reyes, C.P., Muñoz-Martínez, F., Torrecillas, I.R., Mendoza, C.R., Gamarro, F., Bazzocchi, I.L., Nuñez, M.J., Pardo, L., Castanys, S., Campillo, M., Jiménez, I.A. <i>J Med Chem</i> (2007) 50, 4808-17. DOI: <a href="https://doi.org/10.1021/jm070290v">https://doi.org/10.1021/jm070290v</a>	<i>Crossopetalum uragoga</i>

### 5.3. ESTADÍSTICA DE ARTÍCULOS SELECCIONADOS

Se tomaron en cuenta distintas variables de clasificación establecidas: año de publicación, familia botánica y especies vegetales estudiadas. A continuación, se presentan los resultados derivados del análisis enfocado en caracterizar las tendencias de la investigación científica de productos naturales en El Salvador.

#### 5.3.1. Año de publicación

La Tabla N° 12, muestra la cantidad de artículos científicos que cumplieron con los criterios de inclusión y exclusión organizados por año de publicación. Los años no contemplados se debe a la inexistencia de registros de publicaciones de artículos o bien que no cumplían con los criterios establecidos.

Así, en la Figura N° 23, se muestra el número total de artículos de aislamiento de PN en El Salvador distribuidos por año de publicación, las barras representan la cantidad sobre el total de los 25 artículos seleccionados, el mayor número de publicaciones encontradas proceden de los años 2004, 2011 y 2012 con 3 artículos por año, seguido por 2 artículos en los años 2016, 2015 y 2006, evidenciando que los años con menos publicaciones de artículos fue en 2021, 2019, 2017, 2013, 2009, 2008, 2007, 2005, 2003 y 2022 (hasta la fecha) con una publicación por año.

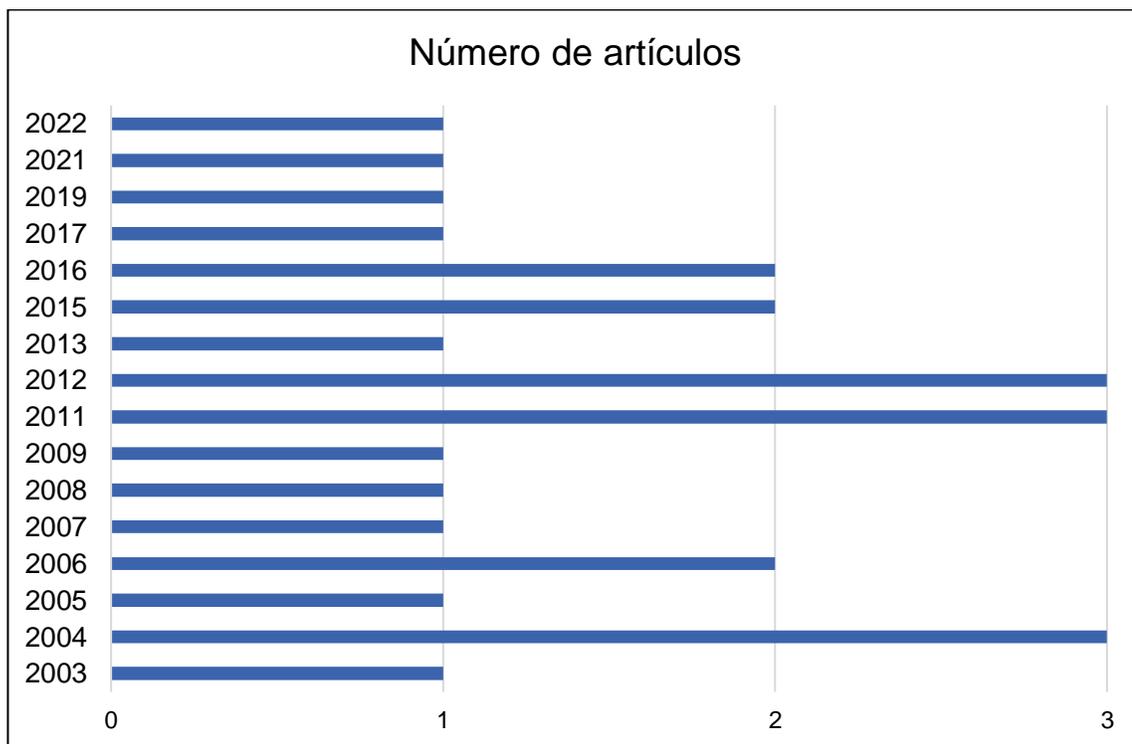


Figura N° 23. Distribución de artículos según año de publicación.

Tabla N° 12. Distribución de artículos según año de publicación.

<b>AÑO DE PUBLICACIÓN</b>	<b>NÚMERO DE ARTÍCULOS</b>
2003	1
2004	3
2005	1
2006	2
2007	1
2008	1
2009	1
2011	3
2012	3
2013	1
2015	2
2016	2
2017	1
2019	1

Tabla N° 12. (Continuación).

<b>AÑO DE PUBLICACIÓN</b>	<b>NÚMERO DE ARTÍCULOS</b>
2021	1
2022	1

### 5.3.2. Familia botánica de las especies vegetales

En el diagrama de barras de la Figura N° 24, se observa que el enfoque de las investigaciones científicas de las especies vegetales salvadoreñas está dirigido preferentemente a la familia de las Celastraceae con 20 artículos publicados, seguido de 2 artículos de la familia Asteraceae y, por último, un solo artículo para las familias Lamiaceae, Solanaceae y Piperaceae.

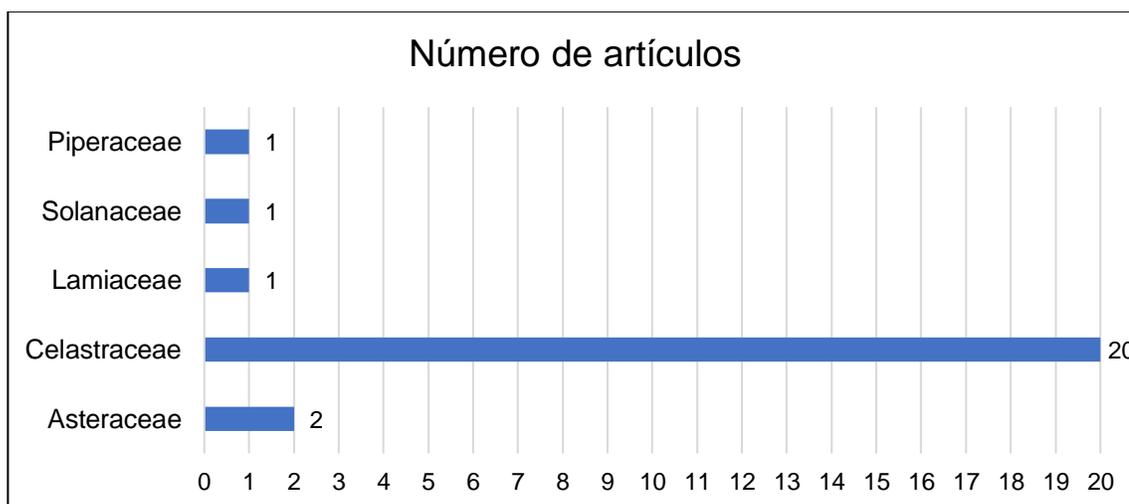


Figura N° 24. Distribución de artículos según familia botánica.

Tabla N° 13. Distribución de artículos según familia botánica.

<b>FAMILIA BOTÁNICA</b>	<b>NÚMERO DE ARTÍCULOS</b>
Asteraceae	2
Celastraceae	20
Lamiaceae	1
Solanaceae	1
Piperaceae	1

### 5.3.3. Especies vegetales estudiadas

De los 25 artículos científicos seleccionados, se obtuvieron registros del aislamiento de metabolitos secundarios de un total de 9 especies vegetales. La familia Celastraceae cuenta con el mayor número de especies vegetales en todo el estudio (5 especies), seguida de las familias Lamiaceae, Solanaceae, Piperaceae y Asteraceae (1 especie cada una). En la Tabla N° 14 y diagrama de barras de la Figura N° 25, se observa que el enfoque de las investigaciones científicas de las especies vegetales salvadoreñas está dirigido principalmente a *Celastrus vulcanicola* con 9 artículos publicados, seguido de *Maytenus chiapensis* con 6 artículos, siendo así las especies de mayor prevalencia en las investigaciones salvadoreñas pertenecientes a la familia Celastraceae. En esta línea, las especies más estudiadas presentan estructuras privilegiadas, con una extraordinaria diversidad y complejidad estructural, y son un excelente punto de partida para el diseño de fármacos. (11)

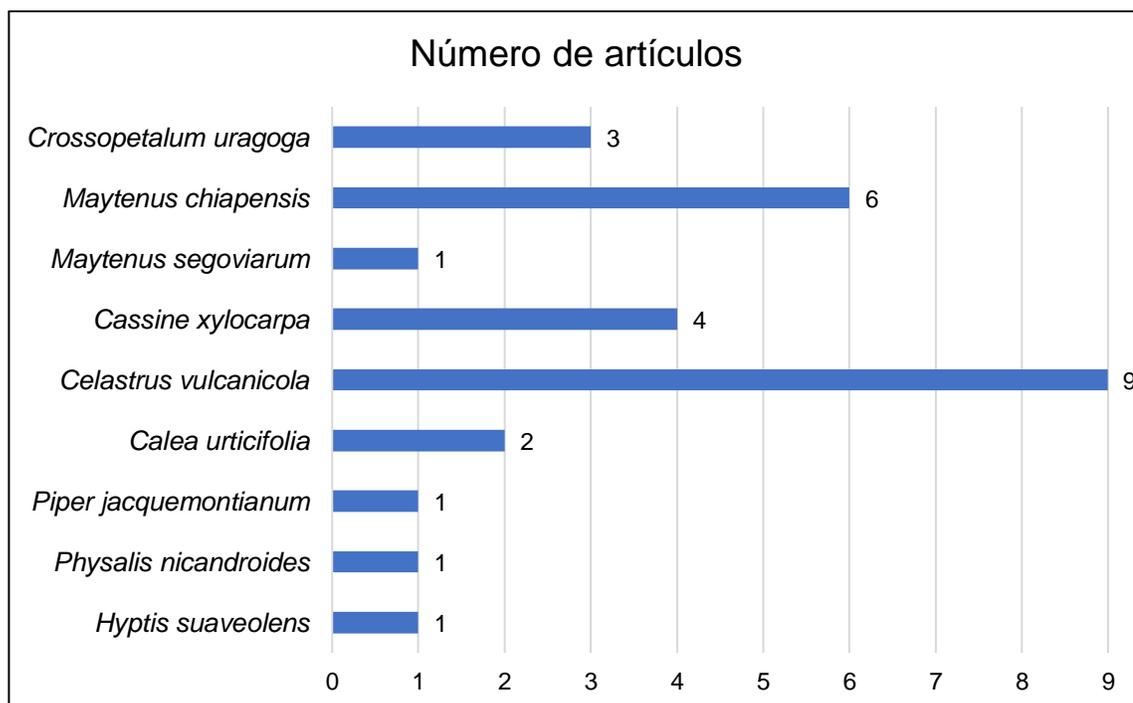


Figura N° 25. Distribución de especies vegetales por número de artículos.

Tabla N° 14. Distribución de especies vegetales por número de artículos.

FAMILIA BOTÁNICA	ESPECIES VEGETALES:	NÚMERO DE ARTÍCULOS
Lamiaceae	<i>Hyptis suaveolens</i>	1
Solanaceae	<i>Physalis nicandroides</i>	1
Piperaceae	<i>Piper jacquemontianum</i>	1
Asteraceae	<i>Calea urticifolia</i>	2
Celastraceae	<i>Celastrus vulcanicola</i>	9
	<i>Cassine xylocarpa</i>	4
	<i>Maytenus segoviarum</i>	1
	<i>Maytenus chiapensis</i>	6
	<i>Crossopetalum uragoga</i>	3

#### 5.4. PROCESAMIENTO DE ESTRUCTURAS: CREACIÓN DE CÓDIGOS SMILES Y JME

El procesamiento de los 25 artículos científicos seleccionados se realizó empleando la herramienta quimioinformática JME-X para generar los códigos SMILES y JME, además de proporcionar la numeración y tipos de carbono en la tabla de desplazamientos para cada PN. Se recopiló la información estructural y espectroscópica de los metabolitos secundarios de los artículos que cumplieron con todos los parámetros de inclusión y extracción en las plantillas Excel creadas para cada artículo.

Todos los códigos generados a partir de las 110 estructuras se incluyeron en la base de datos de la aplicación NAPROC-13 y su clasificación inicial fue en base a la familia botánica de las especies vegetales estudiadas.

##### 5.4.1. Estructuras generadas familia: Lamiaceae

Se obtuvo información estructural y espectroscópica de dos diterpenos de la serie de abietano a partir del estudio de *Hyptis suaveolens*. Investigaciones llevadas a cabo en esta especie, reportan actividad antioxidante, antiinflamatoria,

antimicrobiana, antidiarreica, antiparasitaria, antidiabética, anticancerígena y cicatrizante debido a su amplia gama de metabolitos secundarios, principalmente por los aceites esenciales aislados de las partes aéreas. (12)

Entre los compuestos que destacan se encuentran los diterpenos, que ofrecen una excelente fuente de nuevas entidades químicas con potencial terapéutico. Teniendo en cuenta el interés por las estructuras de esta clase de compuestos, que se encuentran ampliamente distribuidas en esta familia vegetal, fue de vital importancia su procesamiento e inclusión en la base de datos NAPROC-13. (12) A continuación se detalla las estructuras de los metabolitos secundarios aislados de esta familia:

- Estructuras de abietanos, artículo clave: z06\_165:

Propiedades			
Nombre Trivial: Suaveolol			
Nombre Sistemático:			
Familia : Terpenoids	Grupo : Diterpenoids	Tipo : Abietanes	
Disolvente : CDCl <sub>3</sub>	Fórmula Molecular : C <sub>20</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub>	Peso molecular : 306.4848	
Bibliografía : Grassi, P., Reyes, T.S.U., Sosa, S., Tubaro, A., Hofer, O., Zitterl-Eglseer, K. <i>Z Naturforsch, C: Biosci</i> (2006) 61, 165-70			
Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup> C			
Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH2	35.7
2	2	CH2	18.2
3	3	CH2	34.8
4	4	C	37.6
5	5	CH	44.4
6	6	CH2	21.7
7	7	CH2	24.3
8	8	C	128.5
9	9	C	142.7
10	10	C	37.6
11	11	CH2	28.0
12	12	CH2	18.2
13	13	CH	48.8
14	14	CH	73.3
15	15	CH	27.1
16	16	CH3	17.1
17	17	CH3	21.3
18	18	CH2	71.5
19	19	CH3	17.5
20	20	CH3	19.5

Estructura		
Numeración	δ(ppm)	Sin numeración

Figura N° 26. Captura NAPROC-13: compuesto 1, clave z06\_165\_1.

Propiedades			
Nombre Trivial: Methyl Suaveolate			
Nombre Sistemático:			
Familia : Terpenoids	Grupo : Diterpenoids	Tipo : Abietanes	
Disolvente : CDCl <sub>3</sub>	Fórmula Molecular : C <sub>21</sub> H <sub>34</sub> O <sub>3</sub>	Peso molecular : 334.4949	
Bibliografía : Grassi, P., Reyes, T.S.U., Sosa, S., Tubaro, A., Hofer, O., Zitterl-Eglseer, K. <i>Z Naturforsch, C: Biosci</i> (2006) 61, 165-70			
Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup> C		Estructura	
Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH2	35.7
2	2	CH2	18.6
3	3	CH2	37.6
4	4	C	48.1
5	5	CH	46.5
6	6	CH2	21.5
7	7	CH2	24.0
8	8	C	128.9
9	9	C	142.9
10	10	C	37.2
11	11	CH2	28.4
12	12	CH2	18.6
13	13	CH	48.4
14	14	CH	72.8
15	15	CH	26.9
16	16	CH3	17.1
17	17	CH3	21.4
18	18	C	187.0
19	19	CH3	17.6
20	20	CH3	19.5
18a	18001	CH3	50.8

Numeración	δ(ppm)	Sin numeración
1	35.7	
2	18.6	
3	37.6	
4	48.1	
5	46.5	
6	21.5	
7	24.0	
8	128.9	
9	142.9	
10	37.2	
11	28.4	
12	18.6	
13	48.4	
14	72.8	
15	26.9	
16	17.1	
17	21.4	
18	187.0	
19	17.6	
20	19.5	
18001	50.8	

Figura N° 27. Captura NAPROC-13: compuesto 2, clave z06\_165\_2.

#### 5.4.2. Estructuras generadas familia: Asteraceae

Se obtuvo información estructural y espectroscópica de diez metabolitos secundarios aislados de *Calea urticifolia*, que fue publicada en dos artículos científicos. Los PN que destacan de esta especie vegetal son los sesquiterpenoides, que se consideran marcadores quimiotaxonómicos de esta

familia y son responsables de las diferentes actividades biológicas, entre las cuales destacan la actividad citotóxica, antioxidante, antiviral, antimicrobiana, antifúngica, antiinflamatoria y analgésica. <sup>(13)</sup> En total, de los 10 metabolitos que fueron procesados a partir de las estructuras presentadas y datos de RMN <sup>13</sup>C presentes en las publicaciones: 3 corresponden a bisabolanos y 7 a germacranos. A continuación, se presenta un ejemplo de cada uno de los tipos de metabolitos secundarios procesados de esta familia:

- Estructura de germacrano, artículo clave: ph04\_3107:

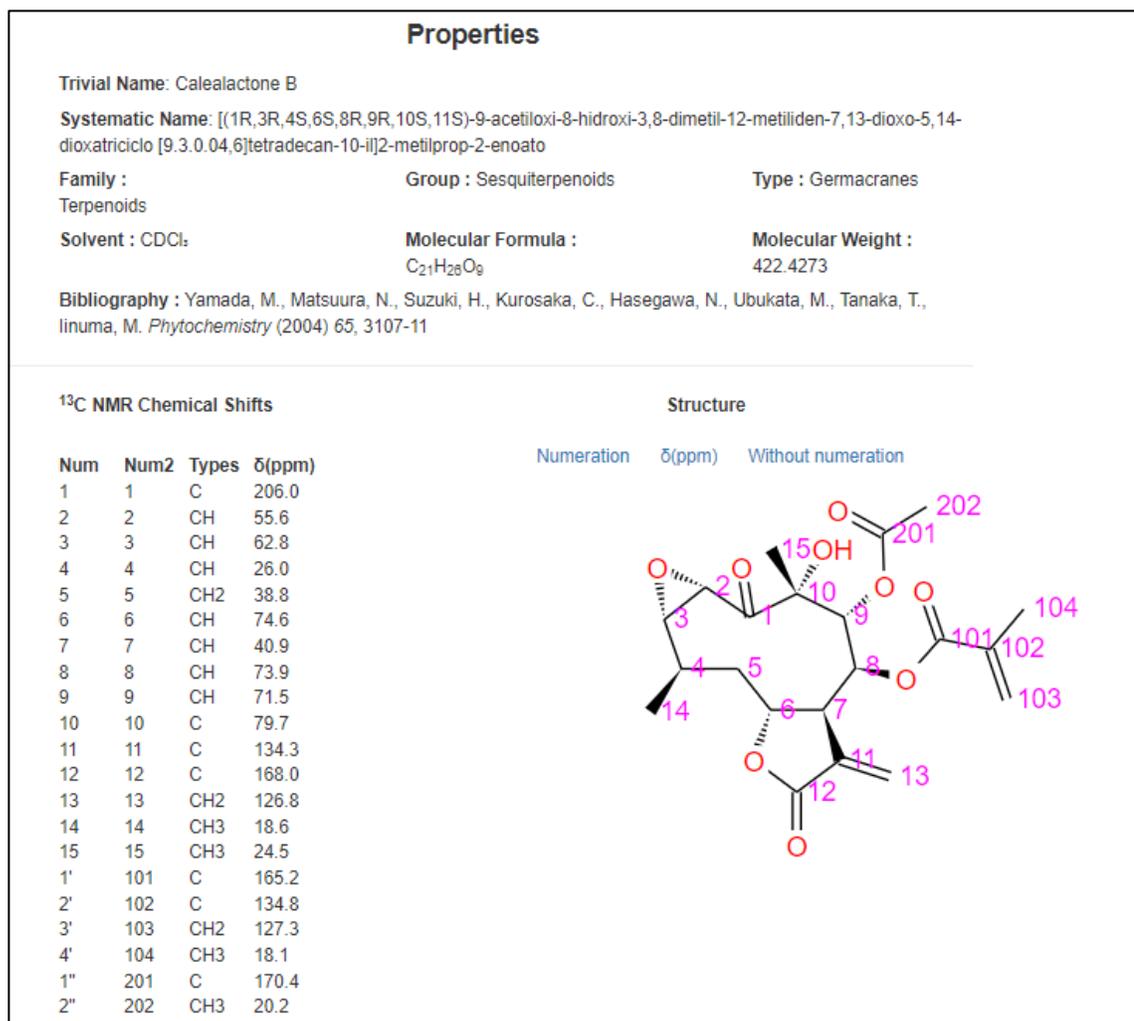


Figura N° 28. Captura NAPROC-13: compuesto 2, clave ph04\_3107\_2.

- Estructura de bisabolano, artículo clave: ph157\_145:

Propiedades			
Nombre Trivial: Caleanolenes A			
Nombre Sistemático:			
Familia : Terpenoids	Grupo : Sesquiterpenoids	Tipo : Bisabolanes	
Disolvente : CDCl <sub>3</sub>	Fórmula Molecular : C <sub>19</sub> H <sub>30</sub> O <sub>4</sub>	Peso molecular : 322.4409	
Bibliografía : Gogineni, V., Nael, M.A., Leon, F., Nuñez, M.J., Cutler, S.J. <i>Phytochemistry</i> (2019) 157, 145-50			
Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup> C		Estructura	
Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH2	31.5
2	2	CH	129.5
3	3	C	136.0
4	4	CH	67.5
5	5	CH2	37.1
6	6	CH	38.7
7	7	C	152.1
8	8	CH2	34.0
9	9	CH2	26.1
10	10	CH	125.5
11	11	C	135.1
12	12	CH3	13.7
13	13	CH2	68.8
14	14	CH2	108.5
15	15	CH2	65.3
1'	101	C	177.8
2'	102	CH	34.1
3'	103	CH3	19.0
4'	104	CH3	19.0

Figura N° 29. Captura NAPROC-13: compuesto 1, clave ph157\_145\_1.

#### 5.4.3. Estructuras generadas familia: Piperaceae

También se obtuvo información estructural y espectroscópica de un flavonoide del tipo flavanona a partir de un estudio de *Piper jacquemontianum*. Investigaciones llevadas a cabo sobre esta especie, reportan actividad antiplasmodial y antileishmanial. <sup>(14)</sup> Especies del género *Piper* atrajeron la atención de investigadores salvadoreños de productos naturales, no solo por sus bioactividades prometedoras, sino también por sus esqueletos novedosos. La mayoría de metabolitos secundarios son alcaloides, lignanos, flavanonas, chalconas y fenilpropanoides. <sup>(15)</sup> Teniendo en cuenta el interés por las estructuras de esta clase de compuestos, fue de vital importancia su procesamiento e inclusión en la base de datos NAPROC-13. A continuación, se detalla la estructura de la flavanona aislada en esta familia:

- Estructura de flavanona, artículo clave: np22\_259\_4:

Properties			
Trivial Name: Jaqueflavanone A			
Systematic Name:			
Family : Flavonoids	Group : Flavonoids	Type : Flavanones	
Solvent : CDCl <sub>3</sub>	Molecular Formula : C <sub>28</sub> H <sub>26</sub> O <sub>7</sub>	Molecular Weight : 474.5034	
Bibliography : Castillo, U.G., Komatsu, A., Martínez, M.L., Menjívar, J., Núñez, M.J., Uekusa, Y., Narukawa, Y., Kiuchi, F., Nakajima-Shimada, J. <i>J Nat Med</i> (2022) 76, 259-67			
<sup>13</sup> C NMR Chemical Shifts		Structure	
Num	Num2	Types	δ(ppm)
2	2	CH	79.9
3	3	CH <sub>2</sub>	43.4
4	4	C	196.2
5	5	C	162.5
6	6	CH	97.7
7	7	C	162.7
8	8	C	108.8
9	9	C	159.6
10	10	C	103.5
1'	101	C	138.0
2'	102	CH	126.1
3'	103	CH	128.9
4'	104	CH	128.0
5'	105	CH	128.9
6'	106	CH	126.1
8a	8001	C	167.5
8b	8002	C	128.5
8c	8003	CH	131.3
8d	8004	C	122.1
8e	8005	C	158.2
8f	8006	CH	116.0
8g	8007	CH	129.7
8h	8008	CH	33.6
8i	8009	CH	122.9
80j	80010	C	136.1
80k	80011	CH <sub>3</sub>	18.2
80l	80012	CH <sub>3</sub>	25.9
80m	80013	CH <sub>3</sub>	52.0

Figura N° 30. Captura NAPROC-13: compuesto 4, clave np22\_259\_4.

#### 5.4.4. Estructuras generadas familia: Solanaceae

En un artículo publicado en el *J. Nat Prod.* se reportó información estructural y espectroscópica de cinco withanólidas obtenidas de *Physalis nicandroides*. Las withanólidas, los componentes más frecuentes del género *Physalis*, se consideran marcadores quimiotaxonómicos de esta familia y son responsables



#### 5.4.5. Estructuras generadas familia: Celastraceae

Se obtuvo información estructural y espectroscópica de 92 metabolitos secundarios a partir de 20 publicaciones científicas encontradas. Las especies estudiadas en dichos artículos fueron *Celastrus vulcanicola*, *Cassine xylocarpa*, *Maytenus segoviarum*, *Maytenus chiapensis* y *Crossopetalum uragoga*.

Los grupos de metabolitos secundarios que destacan de esta especie vegetal son los sesquiterpenoides, considerados indicadores quimiotaxonómicos de la familia Celastraceae. <sup>(17)</sup> Lo que se ve reflejado en la cantidad de metabolitos secundarios introducidos en la base de datos de NAPROC-13, ya que las 61 estructuras de este grupo corresponden al 55% de la cantidad total introducida en la base de datos en este estudio (Figura N° 40). El segundo grupo mayoritario corresponde a los triterpenos que poseen diferentes esqueletos, tanto tetracíclicos como pentacíclicos. Algunos triterpenos, como los friedobaccharanos, se consideran indicadores quimiotaxonómicos de esta familia. Sobre estos metabolitos se han descrito una gran diversidad de actividades biológicas, como antialimentaria, insecticida y recientemente, inmunosupresora, antitumoral, inhibidora de la multirresistencia a fármacos y de la activación del virus Epstein Barr, así como actividad anti-VIH. <sup>(17)</sup>

Los metabolitos secundarios procedentes de Celastraceae introducidos en la base de datos NAPROC-13 se distribuyen de la siguiente manera: 51 sesquiterpenos- $\beta$ -agarofuránicos, 13 triterpenos de la serie del lupano, 13 triterpenos de la serie del oleanano, 2 triterpenos de la serie del friedobaccharano, 3 triterpenos de la serie del montecrinano, un triterpeno de la serie del glutinano y un diterpeno de la serie del abietano. A continuación, se presenta un ejemplo de cada uno de los tipos de metabolitos secundarios procesados de esta familia:

- Estructura de triterpeno del friedelano, artículo clave: ph84\_116:

<b>Nombre Trivial:</b>						
<b>Nombre Sistemático:</b> 7 $\beta$ -Hydroxy-3-oxo-D:A-friedooleanan-28-oic acid						
<b>Familia :</b> Terpenoids	<b>Grupo :</b> Triterpenoids	<b>Tipo :</b> Friedelanes				
<b>Disolvente :</b> CDCl <sub>3</sub>	<b>Fórmula Molecular :</b> C <sub>30</sub> H <sub>48</sub> O <sub>4</sub>	<b>Peso molecular :</b> 472.7026				
<b>Bibliografía :</b> Ardiles, A.E., Gonzalez-Rodriguez, A., Nuñez, M.J., Perestelo, N.R., Pardo, V., Jimenez, I.A., Valverde, A.M., Bazzocchi, I.L. <i>Phytochemistry</i> (2012) 84, 116-24						
<b>Desplazamientos Químicos RMN</b> <sup>13</sup> C		<b>Estructura</b>				
<b>Num</b>	<b>Num2</b>	<b>Tipos</b>	<b><math>\delta</math>(ppm)</b>	<b>Numeración</b>	<b><math>\delta</math>(ppm)</b>	<b>Sin numeración</b>
1	1	CH2	22.4			
2	2	CH2	41.7			
3	3	C	212.7			
4	4	CH	58.8			
5	5	C	41.3			
6	6	CH2	48.9			
7	7	CH	68.3			
8	8	CH	52.9			
9	9	C	37.6			
10	10	CH	59.8			
11	11	CH2	31.1			
12	12	CH2	37.8			
13	13	C	39.5			
14	14	C	44.6			
15	15	CH2	32.8			
16	16	CH2	29.2			
17	17	C	38.4			
18	18	CH	38.4			
19	19	CH2	35.1			
20	20	C	28.5			
21	21	CH2	35.8			
22	22	CH2	32.4			
23	23	CH3	6.9			
24	24	CH3	16.1			
25	25	CH3	18.8			
26	26	CH3	21.7			
27	27	CH3	18.5			
28	28	C	183.3			
29	29	CH3	34.3			
30	30	CH3	29.7			

Figura N° 32. Captura NAPROC-13: compuesto 1, clave ph84\_116\_1.

- Estructura de triterpeno del lupano, artículo clave: np15\_1045:

Propiedades			
<b>Nombre Trivial:</b>			
<b>Nombre Sistemático:</b> β,30-Dihydroxylup-20(29)-en-3-one			
<b>Familia :</b> Terpenoids	<b>Grupo :</b> Triterpenoids	<b>Tipo :</b> Lupanes	
<b>Disolvente :</b> CDCl <sub>3</sub>	<b>Fórmula Molecular :</b> C <sub>30</sub> H <sub>48</sub> O <sub>3</sub>	<b>Peso molecular :</b> 456.7032	
<b>Bibliografía :</b> Callies, O., Bedoya, L.M., Beltrán, M., Muñoz, A., Calderón, P.O., Osorio, A.A., Jiménez, I.A., Alcamí, J., Bazzocchi, I.L. <i>J Nat Prod</i> (2015) 78, 1045-55			
Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup> C			
Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH2	42.1
2	2	CH2	34.4
3	3	C	216.7
4	4	C	48.9
5	5	CH	56.5
6	6	CH	69.6
7	7	CH2	42.2
8	8	C	40.0
9	9	CH	50.6
10	10	C	36.7
11	11	CH2	21.3
12	12	CH2	26.7
13	13	CH	37.1
14	14	C	42.9
15	15	CH2	27.4
16	16	CH2	35.3
17	17	C	43.1
18	18	CH	48.9
19	19	CH	43.7
20	20	C	154.6
21	21	CH2	31.7
22	22	CH2	39.8
23	23	CH3	25.0
24	24	CH3	23.7
25	25	CH3	17.0
26	26	CH3	17.1
27	27	CH3	14.8
28	28	CH3	17.7
29	29	CH2	106.9
30	30	CH2	65.0

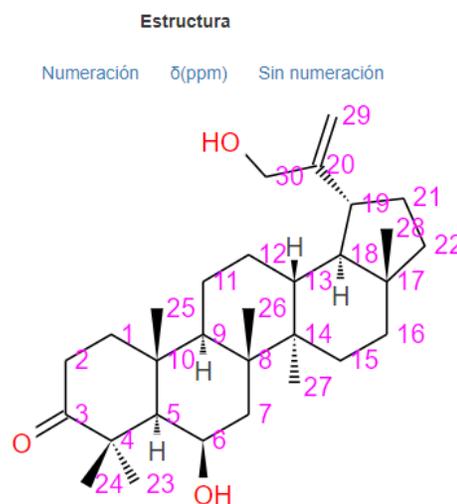


Figura N° 33. Captura NAPROC-13: compuesto 1, clave np15\_1045\_1.

- Estructura de sesquiterpeno- $\beta$ -agarofuránico, artículo clave: ph17\_142:

Propiedades			
<b>Nombre Trivial:</b> Vulcanicoline-A			
<b>Nombre Sistemático:</b>			
<b>Familia :</b> Terpenoids	<b>Grupo :</b> Sesquiterpenoids	<b>Tipo :</b> Agarofurans	
<b>Disolvente :</b> CDCl <sub>3</sub>	<b>Fórmula Molecular :</b> C <sub>39</sub> H <sub>43</sub> NO <sub>16</sub>	<b>Peso molecular :</b> 781.7584	
<b>Bibliografía :</b> Callies, O., Nuñez, M.J., Perestelo, N.R., Reyes, C.P., Torres-Romero, D., Jiménez, I.A., Bazzocchi, I.L. <i>Phytochemistry</i> (2017) 142, 21-9			
Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup> C			
Num	Num2	Tipos	$\delta$ (ppm)
1	1	CH	71.2
2	2	CH	69.4
3	3	CH	74.6
4	4	C	70.6
5	5	C	95.2
6	6	CH	73.4
7	7	CH	61.5
8	8	C	195.7
9	9	CH	78.8
10	10	C	52.7
11	11	C	85.4
12	12	CH2	70.5
13	13	CH3	19.5
14	14	CH2	61.6
15	15	CH3	23.7
2'	102	C	165.1
3'	103	C	124.3
4'	104	CH	138.4
5'	105	CH	121.1
6'	106	CH	150.7
7'	107	CH	36.0
8'	108	CH	44.8
9'	109	CH3	11.8
10'	110	CH3	10.7
11'	111	C	173.8
12'	112	C	168.2
1a	1001	C	169.1
1b	1002	CH3	20.4
6a	6001	C	165.1
6b	6002	C	129.5
6c	6003	CH	130.1
6d	6004	CH	128.7
6e	6005	CH	133.6
6f	6006	CH	128.7
6g	6007	CH	130.1
9a	9001	C	169.1
9b	9002	CH3	20.2
14a	14001	C	169.6
14b	14002	CH3	20.5

**Estructura**

Numeración     $\delta$ (ppm)    Sin numeración

Figura N° 34. Captura NAPROC-13: compuesto 1, clave ph17\_142\_1.

- Estructura de friedobaccharano, artículo clave: clave th104\_7367:

Propiedades			
<b>Nombre Trivial:</b> Leonal			
<b>Nombre Sistemático:</b>			
<b>Familia :</b> Terpenoids	<b>Grupo :</b> Triterpenoids	<b>Tipo :</b> DB-Friedobaccharane	
<b>Disolvente :</b> CDCl <sub>3</sub>	<b>Fórmula Molecular :</b> C <sub>30</sub> H <sub>48</sub> O <sub>2</sub>	<b>Peso molecular :</b> 440.336	
<b>Bibliografía :</b> Nuñez, M.J., López, M.R., Jiménez, I.A., Moujir, L.M., Ravelo, A.G., Bazzocchi, I.L. <i>Tetrahedron Lett</i> (2004) 45, 7367-70			
Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup> C			
Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH2	18.0
2	2	CH2	27.7
3	3	CH	76.3
4	4	C	40.8
5	5	C	142.1
6	6	CH	121.8
7	7	CH2	23.7
8	8	CH	44.6
9	9	C	35.5
10	10	CH	50.0
11	11	CH2	34.4
12	12	CH2	32.7
13	13	C	36.5
14	14	C	37.9
15	15	CH2	29.1
16	16	CH2	34.1
17	17	C	32.0
18	18	CH2	44.5
19	19	CH2	41.4
20	20	CH2	24.5
21	21	CH	155.5
22	22	C	138.9
23	23	CH3	29.0
24	24	CH3	25.4
25	25	CH3	17.5
26	26	CH3	15.2
27	27	CH3	20.3
28	28	CH3	32.7
29	29	CH3	9.1
30	30	CH	195.3

Estructura		
Numeración	δ(ppm)	Sin numeración

Figura N° 35. Captura NAPROC-13: compuesto 2, clave th104\_7367\_2.

- Estructura de diterpeno del abietano, artículo clave: ph11\_385:

Propiedades			
<b>Nombre Trivial:</b> Salvadoriol			
<b>Nombre Sistemático:</b>			
<b>Familia :</b> Terpenoids	<b>Grupo :</b> Diterpenoids	<b>Tipo :</b> Abietanes	
<b>Disolvente :</b> CDCl <sub>3</sub>	<b>Fórmula Molecular :</b> C <sub>20</sub> H <sub>30</sub> O <sub>2</sub>	<b>Peso molecular :</b> 302.4528	
<b>Bibliografía :</b> Nuñez, M.J., Reyes, C.P., Jiménez, I.A., Hayashi, H., Tokuda, H., Bazzocchi, I.L. <i>Phytochemistry</i> (2011) 72, 385-90			
Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup> C			
Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH2	42.4
2	2	CH2	19.6
3	3	CH2	43.1
4	4	C	34.2
5	5	CH	52.8
6	6	CH	65.0
7	7	CH2	35.5
8	8	C	117.9
9	9	C	147.7
10	10	C	37.2
11	11	CH	117.3
12	12	CH	123.7
13	13	C	129.7
14	14	C	150.5
15	15	CH	26.9
16	16	CH3	22.7
17	17	CH3	22.6
18	18	CH3	33.7
19	19	CH3	26.9
20	20	CH3	23.8

Estructura		
Numeración	δ(ppm)	Sin numeración

Figura N° 36. Captura NAPROC-13: compuesto 3, clave ph11\_385\_3.

- Estructura de triterpeno del oleanano, artículo clave: ph13\_148:

Propiedades			
<b>Nombre Trivial:</b> Xyloketal			
<b>Nombre Sistemático:</b>			
<b>Familia :</b> Terpenoids	<b>Grupo :</b> Triterpenoids	<b>Tipo :</b> Oleananes	
<b>Disolvente :</b> CDCl <sub>3</sub>	<b>Fórmula Molecular :</b> C <sub>30</sub> H <sub>48</sub> O <sub>3</sub>	<b>Peso molecular :</b> 456.7032	
<b>Bibliografía :</b> Núñez, M.J., Ardiles, A.E., Martínez, M.L., Torres-Romero, D., Jiménez, I.A., Bazzocchi, I.L. <i>Phytochem Lett</i> (2013) 6, 148-51			
Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup> C			
Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH2	34.7
2	2	CH2	29.4
3	3	C	98.0
4	4	C	40.0
5	5	CH	50.2
6	6	CH2	19.4
7	7	CH2	30.8
8	8	C	38.5
9	9	CH	41.6
10	10	C	35.0
11	11	CH2	23.6
12	12	CH	122.3
13	13	C	143.4
14	14	C	41.6
15	15	CH2	25.8
16	16	CH2	28.0
17	17	C	36.0
18	18	CH	47.0
19	19	CH2	46.5
20	20	C	36.0
21	21	CH	73.8
22	22	CH2	45.0
23	23	CH3	27.0
24	24	CH3	18.0
25	25	CH2	67.7
26	26	CH3	17.0
27	27	CH3	25.1
28	28	CH3	28.1
29	29	CH3	16.6
30	30	CH3	28.8

Estructura		
Numeración	δ(ppm)	Sin numeración

Figura N° 37. Captura NAPROC-13: compuesto 1, clave ph13\_148\_1.

- Estructura de triterpeno del glutinano, artículo clave: ph13\_148:

Propiedades			
<b>Nombre Trivial:</b>			
<b>Nombre Sistemático:</b> 3β,21α-Dihydroxyglut-5-ene			
<b>Familia :</b> Terpenoids	<b>Grupo :</b> Triterpenoids	<b>Tipo :</b> Glutinanes	
<b>Disolvente :</b> CDCl <sub>3</sub>	<b>Fórmula Molecular :</b> C <sub>30</sub> H <sub>50</sub> O <sub>2</sub>	<b>Peso molecular :</b> 442.7198	
<b>Bibliografía :</b> Núñez, M.J., Ardiles, A.E., Martínez, M.L., Torres-Romero, D., Jiménez, I.A., Bazzocchi, I.L. <i>Phytochem Lett</i> (2013) 6, 148-51			
Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup> C		Estructura	
Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH2	18.2
2	2	CH2	27.8
3	3	CH	76.3
4	4	C	40.8
5	5	C	141.7
6	6	CH	122.0
7	7	CH2	23.8
8	8	CH	45.7
9	9	C	34.8
10	10	CH	49.7
11	11	CH2	29.9
12	12	CH2	29.7
13	13	C	38.4
14	14	C	38.6
15	15	CH2	34.3
16	16	CH2	36.3
17	17	C	32.9
18	18	CH	44.7
19	19	CH2	35.8
20	20	C	34.5
21	21	CH	74.7
22	22	CH2	46.3
23	23	CH3	25.4
24	24	CH3	28.9
25	25	CH3	16.6
26	26	CH3	17.0
27	27	CH3	19.1
28	28	CH3	33.1
29	29	CH3	32.3
30	30	CH3	24.6

Numeración	δ(ppm)	Sin numeración
25	16.6	32
32	33.1	35
35	45.7	75
75	76.3	46
46	36.3	33
33	35.8	36
36	34.3	33
33	32.9	36
36	34.5	34
34	38.4	36
36	38.6	36
36	34.3	36
36	36.3	36
36	32.9	36
36	44.7	36
36	35.8	36
36	34.5	36
36	74.7	36
36	46.3	36
36	25.4	36
36	28.9	36
36	16.6	36
36	17.0	36
36	19.1	36
36	33.1	36
36	32.3	36
36	24.6	36

Figura N° 38. Captura NAPROC-13: compuesto 2, clave ph13\_148\_2.

- Estructura de triterpeno del montecrinano, artículo clave: ejc16\_7582:

Properties			
Trivial Name: Montecrinane A			
Systematic Name:			
Family : Terpenoids	Group : Triterpenoids	Type : Montecrinanes	
Solvent : CDCl <sub>3</sub>	Molecular Formula : C <sub>30</sub> H <sub>48</sub> O <sub>2</sub>	Molecular Weight : 440.7038	
Bibliography : Purino, M., Ardiles, A.E., Callies, O., Jiménez, I.A., Bazzocchi, I.L. <i>Chem Eur J</i> (2016) 22, 7582-91			
<sup>13</sup> C NMR Chemical Shifts			
Num	Num2	Types	δ(ppm)
1	1	CH2	38.5
2	2	CH2	34.9
3	3	C	216.7
4	4	C	47.9
5	5	CH	52.3
6	6	CH2	24.3
7	7	CH	118.5
8	8	C	144.4
9	9	CH	48.7
10	10	C	35.0
11	11	CH2	18.3
12	12	CH2	34.6
13	13	C	44.2
14	14	C	52.2
15	15	CH	76.7
16	16	CH2	40.5
17	17	CH	35.7
18	18	CH	50.8
19	19	CH2	36.1
20	20	CH2	24.9
21	21	CH	124.9
22	22	C	131.2
23	23	CH3	24.5
24	24	CH3	21.5
25	25	CH3	12.8
26	26	CH3	19.3
27	27	CH3	22.1
28	28	CH3	18.1
29	29	CH3	25.7
30	30	CH3	17.6

Structure		
Numeration	δ(ppm)	Without numeration

Figura N° 39. Captura NAPROC-13: compuesto 1, clave ejc16\_7582\_1.

## 5.5. ESTADÍSTICA DE ESTRUCTURAS INTRODUCIDAS

Fueron introducidas 110 estructuras de metabolitos secundarios en la base de datos NAPROC-13, extraídas de los 25 artículos seleccionados, junto con sus referencias bibliográficas y sus respectivos DOI. Se tomó en cuenta la jerarquía de metabolitos secundarios establecida por NAPROC-13: familia > grupo > tipo, analizando cada una de ellas y observando su comportamiento y tendencia dentro de las investigaciones salvadoreñas.

### 5.5.1. Familias de compuestos

La incorporación de la jerarquía completa para cada metabolito secundario brindó la oportunidad de examinar la distribución de las clases de compuestos en las investigaciones salvadoreñas de aislamiento de PN.

De los 25 artículos utilizados para consolidar y actualizar la información de NAPROC-13, fueron ingresadas a la base de datos 110 sustancias aisladas de diversas especies vegetales salvadoreñas, pertenecientes en su mayoría a la familia de los terpenoides con 104 estructuras, seguido de los esteroides con 5 estructuras y por último con una sola estructura aislada de la familia de los flavonoides (Tabla N° 15).

Tabla N° 15. Cantidad de estructuras por familias introducidas en NAPROC-13.

FAMILIAS DE COMPUESTOS	CANTIDAD INTRODUCIDA
Terpenoides	104
Flavonoides	1
Esteroides	5

Los terpenoides que son la familia de metabolitos secundarios más numerosa, presentan una amplia gama de propiedades farmacológicas que se derivan de numerosos estudios *in vitro*, preclínicos y clínicos. La diversa colección de

estructuras y funciones de los terpenoides ha provocado un mayor interés en las investigaciones científicas salvadoreñas, ya que la mayoría de las estructuras de estos compuestos y sus variaciones son potencialmente biológicamente activos que podrían resultar útiles para el tratamiento de diversas patologías. (17)

### 5.5.2. Grupos de compuestos

La Tabla N° 16 muestra la cantidad de estructuras introducidas en la base de datos de NAPROC-13 distribuidas por grupos de compuestos. Destaca el grupo de los sesquiterpenoides con 61 estructuras (55%), seguido de los grupos triterpenoides con 40 estructuras (36%), dentro de los esteroides, los ergostanos con 5 estructuras (5%), diterpenoides con 3 estructuras (3%) y por último el grupo de los flavonoides con 1 estructura (1%) introducida (Figura N° 40).

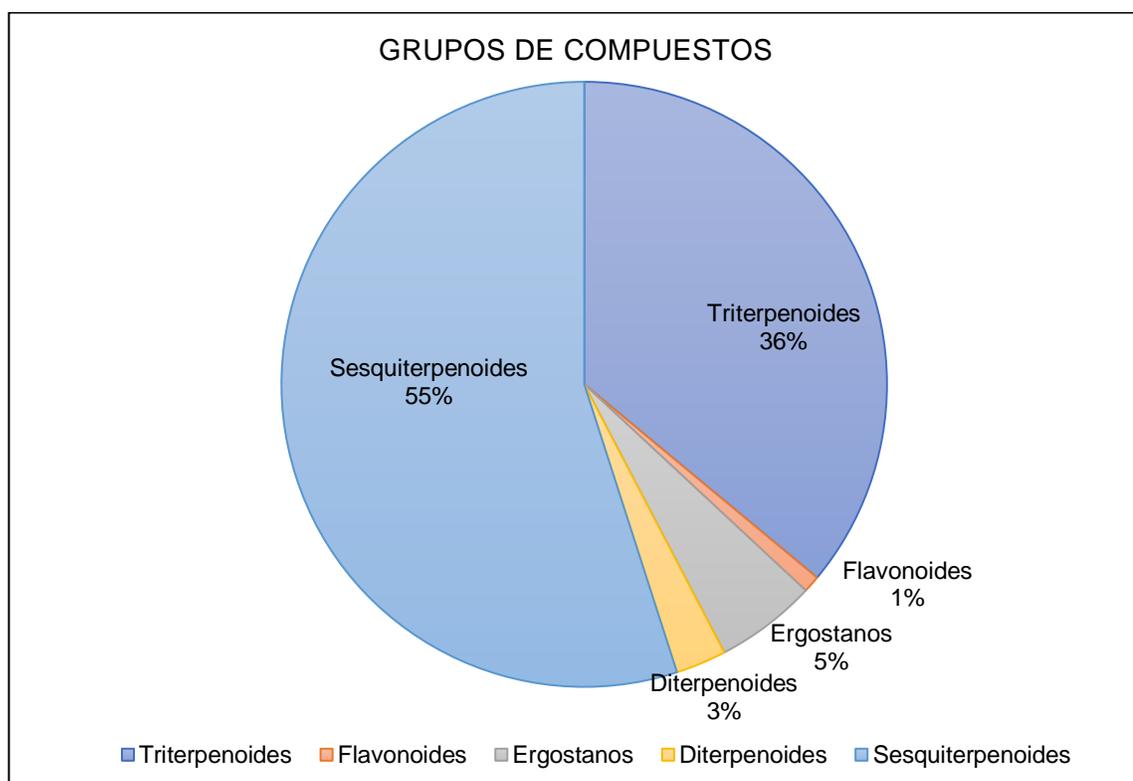


Figura N° 40. Porcentaje de grupos de compuestos introducidos en la base de datos NAPROC-13.

Tabla N° 16. Cantidad de estructuras por grupos introducidas en NAPROC-13.

FAMILIA DE COMPUESTOS	GRUPOS DE COMPUESTOS	CANTIDAD INTRODUCIDA	PORCENTAJE
Esteroides	Ergostanos	5	5
Flavonoides	Flavonoides	1	1
Terpenoides	Triterpenoides	40	36
	Diterpenoides	3	3
	Sesquiterpenoides	61	55

### 5.5.3. Tipos de compuestos

La Figura N° 29 y Tabla N° 17 muestran la distribución en porcentaje de los metabolitos secundarios introducidos en la base de datos NAPROC-13. El 47% de las estructuras fueron de tipo sesquiterpenos- $\beta$ -agarofuránicos, siendo estos los más abundantes. Los segundos tipos de compuestos más abundantes corresponden al de los triterpenos del tipo lupano (12%) y del oleanano (12%), constituyendo los 3 tipos de mayor proporción en las investigaciones científicas salvadoreñas. Lo más probable es que esto se deba a que estos metabolitos secundarios han recibido más atención en estudios que se centran en identificar nuevos compuestos que a menudo se identifican en las mismas especies vegetales.

La tendencia general impulsada de las investigaciones científicas salvadoreñas en el descubrimiento de nuevos productos naturales está dirigida especialmente por el aislamiento de metabolitos del grupo de los sesquiterpenoides (Figura N° 40) específicamente del tipo  $\beta$ -agarofuránicos, ya que constituyen cerca del 50% de las estructuras aisladas en el país (Figura N° 41). Dentro de este grupo, los compuestos muestran una gran similitud estructural, que respalda el hecho que los nuevos descubrimientos de PN no están orientados al descubrimiento de estructuras con esqueletos novedosos, sino más bien, a encontrar compuestos

con similitudes y variaciones estructurales de compuestos ya publicados anteriormente con potencial acción terapéutica.

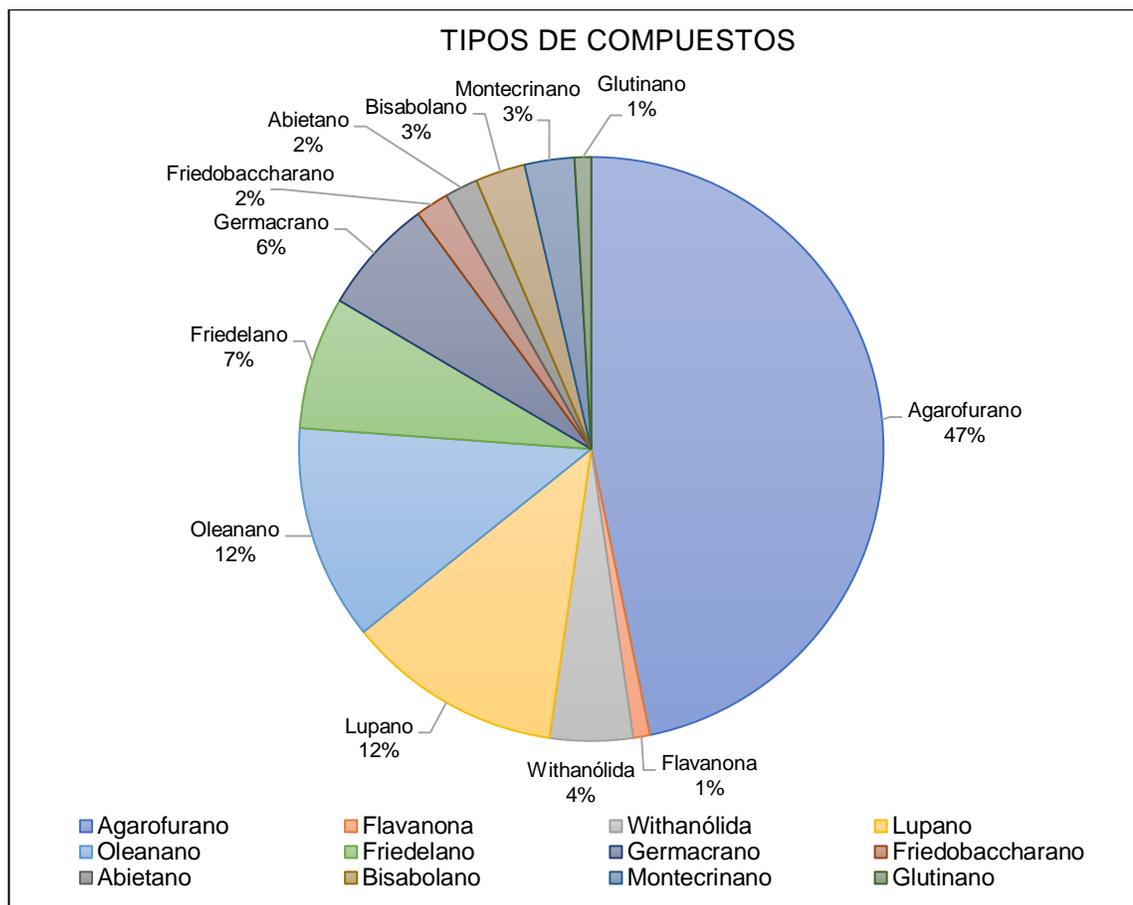


Figura N° 41. Porcentaje de tipos de compuestos introducidos en NAPROC-13.

Tabla N° 17. Cantidad de estructuras por tipo introducidas en NAPROC-13.

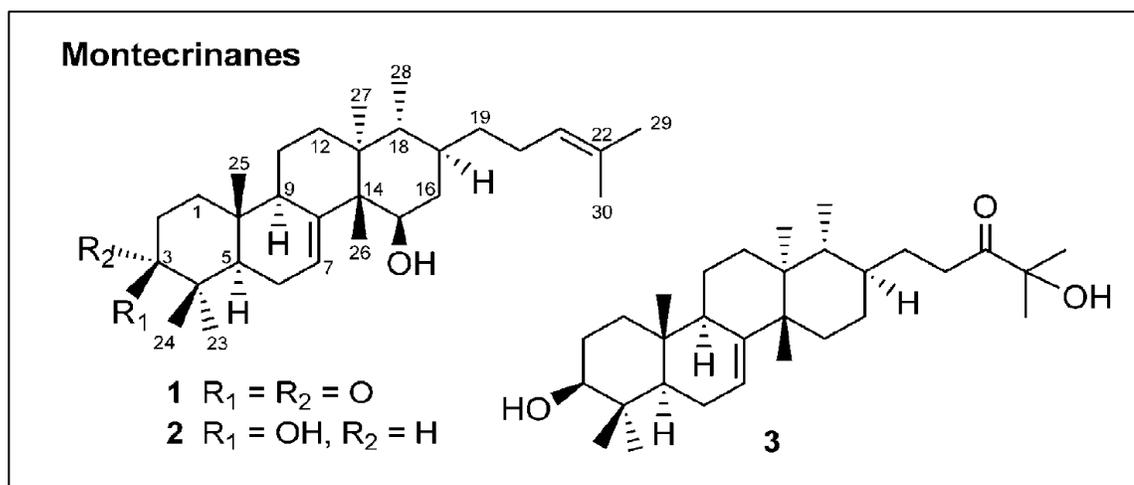
FAMILIA DE COMPUESTOS	GRUPO DE COMPUESTOS	TIPOS DE COMPUESTOS	CANTIDAD	PORCENTAJE
Flavonoides	Flavonoides	Flavanona	1	1
Esteroides	Ergostanos	Withanólida	5	4
Terpenoides	Diterpenoides	Abietano	2	2
	Triterpenoides	Friedobaccharano	2	2
		Lupano	13	12
		Oleanano	13	12

Tabla N° 17. (Continuación).

FAMILIA DE COMPUESTOS	GRUPO DE COMPUESTOS	TIPOS DE COMPUESTOS	CANTIDAD	PORCENTAJE
		Oleanano	13	12
		Friedelano	8	7
		Glutinano	1	1
		Montecrinano	3	3
	Sesquiterpenoides	Bisabolano	3	3
		Agarofurano	51	47
		Germacrano	7	6

## 5.5.4. Aportes novedosos a la base de datos

En las estructuras de los compuestos 1, 2 y 3 (Figura N° 42) del artículo clave bmc06\_1573 de la familia Celastraceae (Tabla N° 11), fue detectado un esqueleto nunca antes descrito en otras investigaciones científicas.

Figura N° 42. Estructura de montecrinanos 1–3 aislados de *C. vulcanicola*.

En el artículo dichos compuestos son descritos como triterpenos con un esqueleto tetracíclico reorganizado 6/6/6/6 sin precedentes. Este esqueleto de montecrinano podría ser indicativo de una vía divergente para la biosíntesis de

triterpenos tetracíclicos a partir de la vía biosintética propuesta en el artículo; por lo tanto, se espera que se aislen más metabolitos secundarios a futuro en especies de Celastraceae que contengan este esqueleto. (23)

De esta manera se ha creado así en la base de datos NAPROC-13 la primera clasificación por tipos de compuestos denominada “Montecrinanes” y que actualmente cuenta solamente con las 3 estructuras novedosas introducidas (Figura N° 43).

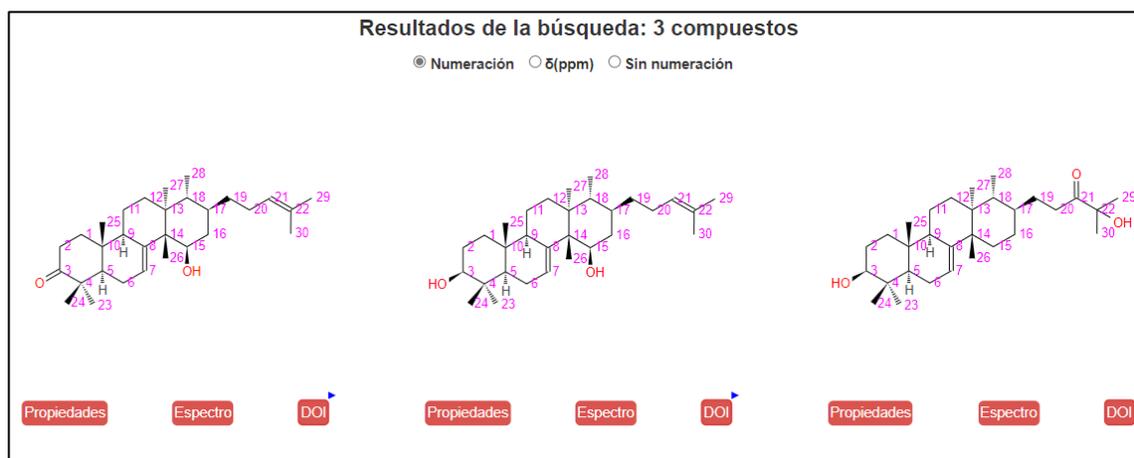


Figura N° 43. Estructuras introducidas en NAPROC-13 de montecrinanos 1–3.

## 5.6. ADICIONES O CAMBIOS DE DESPLAZAMIENTOS QUÍMICOS

En este apartado se detallan todas aquellas adiciones o cambios de desplazamientos químicos por similitud con otras sustancias estrechamente relacionadas a todas aquellas estructuras que presentaron inconsistencias, contemplando las variaciones de los datos aportados por distintos autores para un mismo compuesto.

Las modificaciones se debieron a desplazamientos no incluidos en los resultados de los artículos científicos, ya que se ha evidenciado que las señales de ciertos átomos de carbono no son observables con claridad dentro de los espectros y

por mantener la homogeneidad en los desplazamientos químicos de las estructuras ya introducidas en la base de datos.

- **Compuesto 1 y 2**, artículo clave ejc16\_7582 de la familia Celastraceae:

Para el **compuesto 1** el desplazamiento químico de C-13, no se proporciona en el artículo, asignándole en NAPROC-13 un valor de 44.2 ppm por similitud con el **compuesto 2** de la misma publicación. Además, los desplazamientos químicos de los carbonos C-29 y C-30 para los **compuestos 1 y 2**, se han intercambiado con respecto a la publicación por comparación con otras sustancias relacionadas. La Figura N° 44 a la izquierda presenta la estructura según artículo científico, a la derecha la estructura introducida en NAPROC-13, evidenciando el intercambio de los desplazamientos químicos de C-29 y C-30.

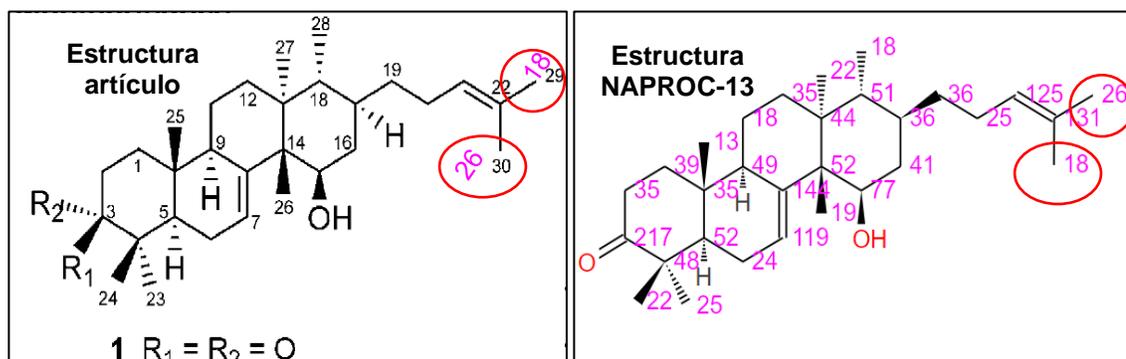


Figura N° 44. **Compuesto 1**, clave: ejc16\_7582\_1.

- **Compuesto 3**, artículo clave bmc06\_1573 de la familia Celastraceae:

Para este compuesto los desplazamientos químicos asignados en la publicación a C-1 correspondiente a 123.6 ppm y C-2 correspondiente a 165.1 ppm, fueron intercambiados por comparación con otras sustancias relacionadas. La Figura N° 45 a la izquierda presenta la estructura según artículo científico y a la derecha la estructura introducida en NAPROC-13, evidenciando el intercambio de los desplazamientos químicos de C-1 y C-2.

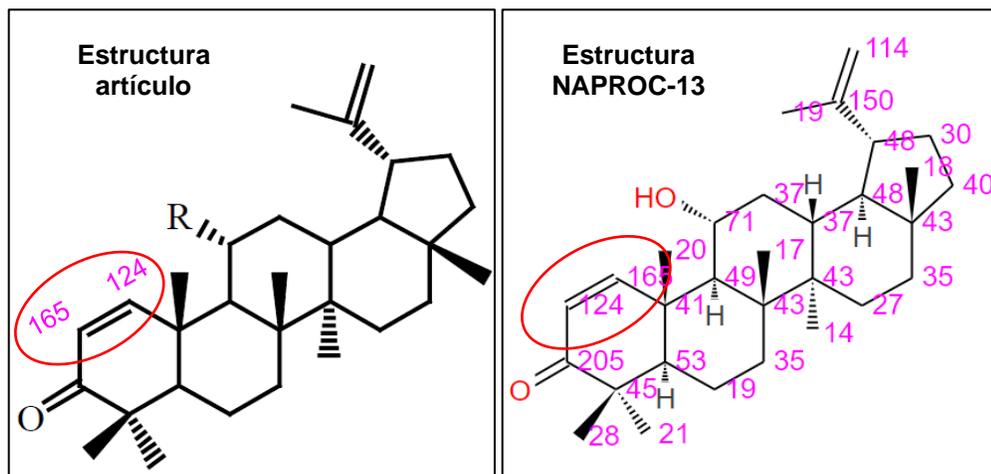


Figura N° 45. **Compuesto 3**, clave: bmc06\_1573\_3.

- **Compuesto 5**, artículo clave np05\_1018 de la familia Celastraceae:

Para este compuesto los desplazamientos químicos asignados en la publicación a C-1 correspondiente a 125.2 ppm y C-2 correspondiente a 159.2 ppm, fueron intercambiados por comparación con otras sustancias relacionadas. La Figura N° 46 a la izquierda presenta la estructura según artículo científico y a la derecha la estructura introducida en NAPROC-13, evidenciando el intercambio de los desplazamientos químicos de C-1 y C-2.

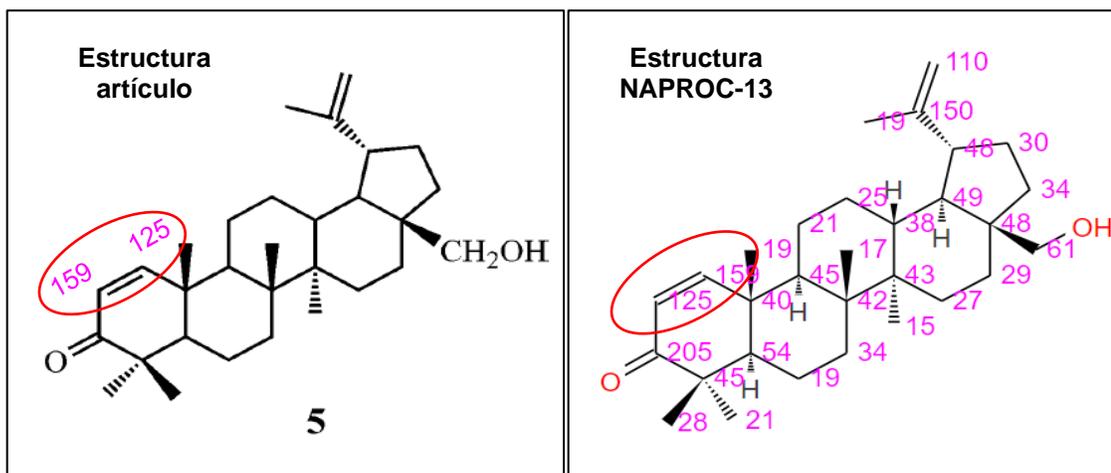


Figura N° 46. **Compuesto 5**, clave: np05\_1018\_5.

- **Compuesto 5**, artículo clave np21\_2717 de la familia Solanaceae:

Para el **compuesto 5**, los desplazamientos químicos asignados a C-5 (83.9 ppm) y a C-6 (62.2 ppm) no parecen compatibles con la propuesta estructural, si los comparamos con los desplazamientos asignados para los **compuestos 1 y 2** de esta misma publicación y con otras withanólidas presentes en la base de datos NAPROC-13 que presentan idéntica estructura en los anillos A y B del esteroide. El valor de 62 ppm asignado al CH del epóxido debería de corresponder con el carbono cuaternario de esta agrupación (C-5), mientras que el desplazamiento de 83.9 ppm asignado a C-5, se tratará de una errata, siendo en realidad 63.9 ppm y debería corresponder a CH-6, tal como se ha corregido y figura en NAPROC-13. (Figura N° 47).

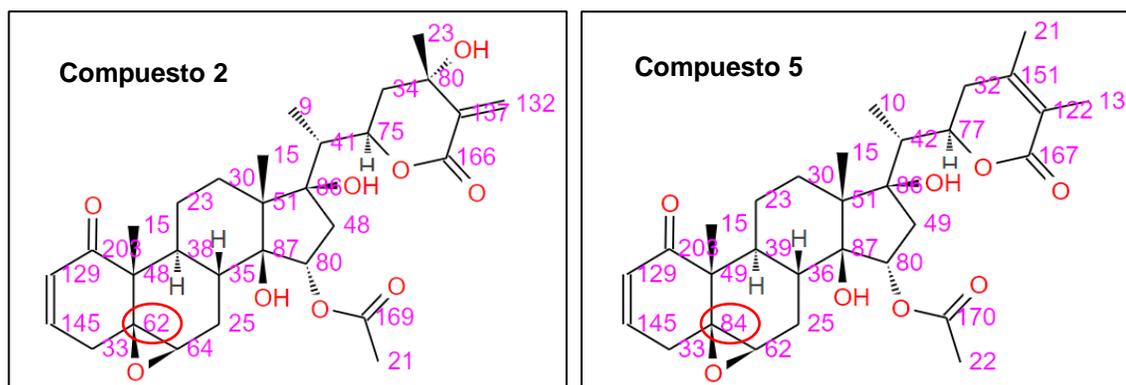


Figura N° 47. **Compuesto 2 y 5**, claves: bmc06\_1573\_2 y bmc06\_1573\_5.

NAPROC-13 ahora proporciona la información clave de todas estas estructuras. Fueron clasificados 110 metabolitos secundarios distribuidos en 12 tipos de compuestos de acuerdo a su esqueleto base. Entre los aportes novedosos, destaca el incorporado de un esqueleto nuevo denominado montecrinano no incluido con anterioridad en esta ni en otras bases de datos. Actualmente, NAPROC-13 cuenta con 183 compuestos de tipo sesquiterpenos- $\beta$ -agarofuránicos, la introducción de 51 nuevas estructuras de este tipo de metabolitos secundarios en la base de datos representa el 28% de la totalidad de

los compuestos de este tipo, representando la parte fundamental y una de las fortalezas del aporte de la investigación salvadoreña de aislamiento de PN a la metabolómica de plantas.

La incorporación de estas 110 estructuras, mediante el uso de la aplicación JME-X supone la implementación completa de todo su conjunto de funcionalidades. Las estructuras 2D depositadas en NAPROC-13 pueden ser copiadas en los formatos SMILES, MOL, MOL V3000, InChI y como gráficos vectoriales escalares, además, la información espectroscópica de los compuestos se puede descargar de forma individual en formato PDF. Entre los beneficios de introducir estas estructuras destaca la búsqueda de PN con alguna relación con una molécula de interés. Por ejemplo, si el usuario desea saber que PN tiene una estructura relacionada a su compuesto en estudio, puede realizar una búsqueda interactiva en la plataforma y tener acceso a la investigación de todos aquellos compuestos con estructura similar, por lo tanto, puede evaluar si estos llegasen a tener propiedades biológicas y farmacológicas similares, y pueden potencialmente usarse como nuevos fármacos (ANEXO N° 1). Reduciendo así costos y tiempo en la investigación (ANEXO N° 2).

**CAPITULO VI**  
**CONCLUSIONES**

## VI. CONCLUSIONES

1. En total, se introdujeron 110 estructuras químicas de 25 artículos científicos de aislamientos de metabolitos secundarios a partir de especies vegetales salvadoreñas. La totalidad de las estructuras eran nuevas en NAPROC-13 en el momento del depósito, resaltando la inclusión de una nueva categoría por tipo de un esqueleto novedoso: montecrinanos.
2. La incorporación de las 110 estructuras químicas en NAPROC-13 incluyen la información bibliográfica completa y un enlace DOI del artículo al artículo original en la revista científica donde aparece publicado. Los usuarios ahora descubrirán investigaciones científicas salvadoreñas en la plataforma utilizando los motores de búsqueda en la base de datos.
3. La introducción de las 110 estructuras de productos naturales de origen salvadoreño en la base de datos NAPROC-13, permitirá a los investigadores emplear con eficacia técnicas de elucidación de sustancias con estructuras relacionadas, utilizando búsquedas iterativas dentro de la plataforma para identificar compuestos puros o un compuesto dentro de una mezcla de estos.
4. Las bases de datos con información estructural y espectroscópica de RMN  $^{13}\text{C}$  de acceso abierto como NAPROC-13 son de gran utilidad para los investigadores de productos naturales. Sin embargo, su cobertura es limitada en comparación con el número total de productos naturales existentes en la actualidad. En este proyecto se destaca el uso de la plataforma en la desreplicación de estructuras y se presentan metodologías útiles para contribuir en el crecimiento de sus entradas, manteniéndola en constante actualización y consolidación de su

información, mejorando así la precisión, cobertura y la funcionalidad de la base de datos.

5. Este proyecto permitió evaluar las tendencias de las investigaciones salvadoreñas en materia de productos naturales y se logró caracterizar la diversidad global de compuestos aislados de especies vegetales nativas haciendo uso de RMN  $^{13}\text{C}$ . Basado en el análisis estadístico, la familia de compuestos de mayor proporción de obtención son los terpenoides, siendo los sesquiterpenos- $\beta$ -agarofuránicos la clase química más representativa.
6. Se destaca que la gran mayoría de compuestos aislados pertenecen a la familia de las Celastráceas, siendo las especies *Celastrus vulcanicola* y *Maytenus chiapensis*, las mayores fuentes de obtención de estos. En esta línea, las especies más estudiadas contienen estructuras privilegiadas con una extraordinaria diversidad y complejidad estructural, que se presentan como un excelente punto de partida para el diseño de fármacos.
7. El descubrimiento de nuevos productos naturales está relacionado principalmente a estructuras de compuestos previamente publicados, debido a que es probable que la mayoría de los nuevos aislamientos compartan similitudes estructurales con los anteriores. Esto no significa que no se espere descubrir nuevos compuestos con esqueletos novedosos, sino más bien que los compuestos nuevos descritos sean variantes químicas de compuestos ya conocidos.

**CAPITULO VII**  
**RECOMENDACIONES**

## VII. RECOMENDACIONES

1. Desarrollar un programa fijo dentro de la Facultad de Química y Farmacia de la Universidad de El Salvador en convenio con la Universidad de Salamanca, España, para el procesamiento de futuras estructuras de PN aisladas de plantas salvadoreñas y su inclusión en la base de datos NAPROC-13.
2. Utilizar la aplicación JME-X en docencia e investigación de la Facultad de Química y Farmacia de la Universidad de El Salvador, ya que su utilidad es de vital interés para las materias relacionadas a la Química Orgánica, Farmacognosia y a la investigación de productos naturales, mejorando los conocimientos acerca de la estructura, la estereoquímica y las normas de representación recomendadas por la IUPAC, permitiendo adaptar la enseñanza a nuevos modelos educativos en el desarrollo de competencias y habilidades en el campo de la química estructural y la elucidación de PN, presentando una alternativa para una modernización y mejora de las metodologías de enseñanza dentro de la facultad.
3. Fomentar el uso de herramientas quimioinformáticas en los estudiantes en los trabajos de graduación, por ejemplo, implementar JME-X y NAPROC-13 en trabajos de Grado de Farmacia que tengan relación con la elucidación estructural, diseño, evaluación y técnicas de detección de PN como potenciales nuevos fármacos.

## BIBLIOGRAFÍA

1. Daylight Chemical Information Systems, Inc. SMILES - A Simplified Chemical Language. [Online]; 2019. Acceso 07 de Octubre de 2021. Disponible en: <https://www.daylight.com/dayhtml/doc/theory/theory.smiles.html>.
2. Ertl P. Molecular structure input on the web. *Journal of Cheminformatics* volume. 2010; 2(1).
3. López-Pérez JL, Theron R, del Olmo E, Santos-Buitrago B, Adserias JF, Estévez C, et al. NAPROC-13: A carbon NMR web database for the structural elucidation of natural products and food phytochemicals. *Advances in Intelligent Systems and Computing*. 2014. p. 9–19.
4. López J, Therón R, Olmo Ed, David Díaz. NAPROC-13: a database for the dereplication of natural product mixtures in bioassay-guided protocols. *Bioinformatics*. 2007; 23(23).
5. Pérez J. Natural Products 13C NMR Database. [Online]; 2007. Acceso 15 de Septiembre de 2021. Disponible en: <https://c13.materia-medica.net/>.
6. Tomiki T, Saito T, Ueki M, Konno H, Asaoka T, Suzuki R, et al. [special issue: Fact databases and freewares] RIKEN natural products encyclopedia (RIKEN NPedia), a chemical database of RIKEN natural products depository (RIKEN NPDepo). *J Comput Aided Chem*. 2006;7:157–62.
7. Universidad de Salamanca; Universidad de Panama; Secretaría Nacional de Ciencia, Tecnología e Innovación. JSME Molecular Editor. [Online]; 2007. Acceso 15 de Septiembre de 2021. Disponible en: [https://c13.materia-medica.net/JSME-X\\_2020/](https://c13.materia-medica.net/JSME-X_2020/).
8. Weininger D, Weininger A, Weininger J. SMILES. 2. Algorithm for generation of unique SMILES notation. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*. 1998; 29(2).

9. Biblioteca Virtual del Sistema de Universidad de Guadalajara. Operadores para búsquedas de información | Biblioteca Virtual del Sistema de Universidad Virtual. [Online]; 2019. Acceso 07 de Octubre de 2021. Disponible en: <http://biblioteca.udgvirtual.udg.mx/portal/operadores-para-busquedas-de-informacion>
10. Diaz, L. Concepto Definición Quiral. academia.edu. [Online]; 2018. Acceso 07 de Octubre de 2021. Disponible en: [https://www.academia.edu/36606944/Concepto\\_Definici%C3%B3n\\_Quiral](https://www.academia.edu/36606944/Concepto_Definici%C3%B3n_Quiral)
- 11 Callies O. Estructuras privilegiadas de especies de la familia celastraceae-fuente para el diseño de nuevos agentes terapéuticos. Universidad de La Laguna; 2014.
- 12 Piozzi F, Bruno M, Rosselli S, Maggio A. The diterpenoids from the genus *Hyptis* (Lamiaceae). *Heterocycles*. 2009;78(6):1413.
- 13 Villacorta JR, Rivas RM, Núñez MJ, Sánchez-Pérez JP, Martínez ML. Cuantificación de sesquiterpenlactonas procedentes de las hojas de *Calea urticifolia* (Asteraceae) durante el año 2012. *Minerva*. 2017; 41–50.
- 14 Salehi B, Zakaria ZA, Gyawali R, Ibrahim SA, Rajkovic J, Shinwari ZK, et al. Piper species: A comprehensive review on their phytochemistry, biological activities and applications. *Molecules*. 2019;24(7):1364.
- 15 Xiang C-P, Shi Y-N, Liu F-F, Li H-Z, Zhang Y-J, Yang C-R, et al. A survey of the chemical compounds of Piper spp. (Piperaceae) and their biological activities. *Nat Prod Commun*. 2016;11(9):1403–8.
- 16 Zhang W-N, Tong W-Y. ChemInform abstract: Chemical constituents and biological activities of plants from the genus *Physalis*. *ChemInform*. 2016;47(11).
- 17 Garnica C. Aislamiento y elucidación estructural de metabolitos secundarios mayoritarios del extracto etanólico de las hojas de la especie *Perrottetia longistylis* (Manteco, Capulaltapa) y el tamizaje fitoquímico y evaluación de

- la actividad antifúngica, antibacteriana y citotóxica del extracto etanólico de las hojas de la especie *Euonymus enantiophylla* (Alís, Rou'j Xiwáan) Familia Celastraceae. [Guatemala]: Universidad de San Carlos de Guatemala; 2008.
- 18 Perveen S. Introductory Chapter: Terpenes and Terpenoids. In: Terpenes and Terpenoids - Recent Advances. *IntechOpen*; 2021.
  - 19 Ardiles AE, González-Rodríguez A, Núñez MJ, Perestelo NR, Pardo V, Jiménez IA, et al. Studies of naturally occurring friedelane triterpenoids as insulin sensitizers in the treatment type 2 diabetes mellitus. *Phytochemistry*. 2012;84:116–24.
  - 20 Callies O, Bedoya LM, Beltrán M, Muñoz A, Calderón PO, Osorio AA, et al. Isolation, Structural Modification, and HIV Inhibition of Pentacyclic Lupane-Type Triterpenoids from *Cassine xylocarpa* and *Maytenus cuzcoina*. *J Nat Prod*. 2015;78(5):1045–55.
  - 21 Callies O, Núñez MJ, Perestelo NR, Reyes CP, Torres-Romero D, Jiménez IA, et al. Distinct sesquiterpene pyridine alkaloids from in Salvadoran and Peruvian Celastraceae species. *Phytochemistry*. 2017;142:21–9.
  - 22 Callies O, Sánchez-Cañete MP, Gamarro F, Jiménez IA, Castanys S, Bazzocchi IL. Restoration of chemosensitivity in P-glycoprotein-dependent multidrug-resistant cells by dihydro- $\beta$ -agarofuran sesquiterpenes from *Celastrus vulcanicola*. *J Nat Prod*. 2015;78(4):736–45.
  - 23 Núñez MJ, Jiménez IA, Mendoza CR, Chavez-Sifontes M, Martinez ML, Ichiishi E, et al. Dihydro- $\beta$ -agarofuran sesquiterpenes from celastraceae species as anti-tumour-promoting agents: Structure-activity relationship. *Eur J Med Chem*. 2016;111:95–102.
  - 24 Núñez MJ, Reyes CP, Jiménez IA, Moujir L, Bazzocchi IL. Lupane triterpenoids from *Maytenus* species. *J Nat Prod*. 2005;68(7):1018–21.
  - 25 Núñez MJ, Cortés-Selva F, Bazzocchi IL, Jiménez IA, González AG, Ravelo AG, et al. Absolute configuration and complete assignment of <sup>13</sup>C NMR data

- for new sesquiterpenes from *Maytenus chiapensis*. *J Nat Prod*. 2003;66(4):572–4.
- 26 Núñez MJ, Guadaño A, Jiménez IA, Ravelo AG, González-Coloma A, Bazzocchi IL. Insecticidal sesquiterpene pyridine alkaloids from *Maytenus chiapensis*. *J Nat Prod*. 2004;67(1):14–8.
- 27 Núñez MJ, López MR, Jiménez IA, Moujir LM, Ravelo AG, Bazzocchi IL. First examples of tetracyclic triterpenoids with a D:B-friedobaccharane skeleton. A tentative biosynthetic route. *Tetrahedron Lett*. 2004;45(39):7367–70.
- 28 Núñez MJ, Reyes CP, Jiménez IA, Hayashi H, Tokuda H, Bazzocchi IL. *ent*-Rosane and abietane diterpenoids as cancer chemopreventive agents. *Phytochemistry*. 2011;72(4–5):385–90.
- 29 Núñez MJ, Ardiles AE, Martínez ML, Torres-Romero D, Jiménez IA, Bazzocchi IL. Unusual D:B-friedobaccharane and oxygenated friedelane-type triterpenoids from Salvadorean Celastraceae species. *Phytochem Lett*. 2012;5(2):244–8.
- 30 Núñez MJ, Ardiles AE, Martínez ML, Torres-Romero D, Jiménez IA, Bazzocchi IL. Triterpenoids from *Cassine xylocarpa* and *Celastrus vulcanicola* (Celastraceae). *Phytochem Lett*. 2013;6(1):148–51.
- 31 Núñez MJ, Kennedy ML, Jiménez IA, Bazzocchi IL. Uragogin and blepharodin, unprecedented hetero-Diels–Alder adducts from Celastraceae species. *Tetrahedron*. 2011;67(17):3030–3.
- 32 Osorio AA, Muñoz A, Torres-Romero D, Bedoya LM, Perestelo NR, Jiménez IA, et al. Olean-18-ene triterpenoids from Celastraceae species inhibit HIV replication targeting NF-κB and Sp1 dependent transcription. *Eur J Med Chem*. 2012;52:295–303.
- 33 Purino M, Ardiles AE, Callies O, Jiménez IA, Bazzocchi IL. Montecrinanes A-C: Triterpenes with an unprecedented rearranged tetracyclic skeleton from

- Celastrus vulcanicola*. Insights into triterpenoid biosynthesis based on DFT calculations. *Chemistry*. 2016;22(22):7582–91.
- 34 Reyes CP, Núñez MJ, Jiménez IA, Busserolles J, Alcaraz MJ, Bazzocchi IL. Activity of lupane triterpenoids from *Maytenus* species as inhibitors of nitric oxide and prostaglandin E2. *Bioorg Med Chem*. 2006;14(5):1573–9.
- 35 Reyes CP, Muñoz-Martínez F, Torrecillas IR, Mendoza CR, Gamarro F, Bazzocchi IL, et al. Biological evaluation, structure-activity relationships, and three-dimensional quantitative structure-activity relationship studies of dihydro-beta-agarofuran sesquiterpenes as modulators of P-glycoprotein-dependent multidrug resistance. *J Med Chem*. 2007;50(20):4808–17.
- 36 Torres-Romero D, Jiménez IA, Rojas R, Gilman RH, López M, Bazzocchi IL. Dihydro- $\beta$ -agarofuran sesquiterpenes isolated from *Celastrus vulcanicola* as potential anti-*Mycobacterium tuberculosis* multidrug-resistant agents. *Bioorg Med Chem*. 2011;19(7):2182–9.
- 37 Torres-Romero D, King-Díaz B, Jiménez IA, Lotina-Hennsen B, Bazzocchi IL. Sesquiterpenes from *Celastrus vulcanicola* as photosynthetic inhibitors. *J Nat Prod*. 2008;71(8):1331–5.
- 38 Torres-Romero D, Muñoz-Martínez F, Jiménez IA, Castanys S, Gamarro F, Bazzocchi IL. Novel dihydro-beta-agarofuran sesquiterpenes as potent modulators of human P-glycoprotein dependent multidrug resistance. *Org Biomol Chem*. 2009;7(24):5166–72.
- 39 Muñoz-Martínez F, Mendoza CR, Bazzocchi IL, Castanys S, Jiménez IA, Gamarro F. Reversion of human Pgp-dependent multidrug resistance by new sesquiterpenes from *Zinowiewia costaricensis*. *J Med Chem*. 2005;48(13):4266–75.
- 40 González AG, Tincusi BM, Bazzocchi IL, Tokuda H, Nishino H, Konoshima T, et al. Anti-tumor promoting effects of sesquiterpenes from *Maytenus cuzcoina* (Celastraceae). *Bioorg Med Chem*. 2000;8(7):1773–8.

- 41 Froelich S, Siems K, Hernández MA, Ibarra RA, Berendsohn WG, Jenett-Siems K. Phenolic glycosides from *Exostema mexicanum* leaves. *Pharmazie*. 2006;61(7):641–4.
- 42 Gogineni V, Nael MA, León F, Núñez MJ, Cutler SJ. Computationally aided stereochemical assignment of undescribed bisabolenes from *Calea urticifolia*. *Phytochemistry*. 2019;157:145–50.
- 43 Yamada M, Matsuura N, Suzuki H, Kurosaka C, Hasegawa N, Ubukata M, et al. Germacranolides from *Calea urticifolia*. *Phytochemistry*. 2004;65(23):3107–11.

## GLOSARIO

- **AND:** operador booleano que localiza registros que comprendan todos los términos de búsqueda que se han especificado. Es la intersección de conjuntos definidos por 2 palabras o sea solo aquellas referencias que contienen a las dos a la vez. <sup>(9)</sup>
- **Booleano:** símbolo que se usa para establecer relaciones entre términos matemáticos o variables admitiendo solo dos respuestas posibles. Admite solo dos posibles respuestas y cuyos valores se excluyen el uno del otro. <sup>(9)</sup>
- **Estereocentro:** o centro estereogénico es cualquier punto, aunque no necesariamente un átomo, en una molécula que lleva grupos tales que el intercambio de dos grupos cualesquiera conduce a un estereoisómero. <sup>(10)</sup>
- **Estereoquímica:** Parte de la química que estudia la distribución geométrica de los compuestos químicos en el espacio. <sup>(10)</sup>
- **Heteroátomos:** Átomo en una cadena o en un anillo de un compuesto orgánico, que no es de carbono ni de hidrógeno. <sup>(10)</sup>
- **Iterativa:** búsqueda iterativa o búsqueda de profundidad iterativa, es un algoritmo de búsqueda no informada utilizado para una estrategia de búsqueda en el espacio de estados en la que se realizan sucesivas búsquedas en profundidad limitada incrementando el límite de profundidad en cada iteración. <sup>(4)</sup>
- **JME:** lenguaje informático diseñado para realizar cálculos y operaciones en estructuras de datos primitivas como un vector o matriz, así como una estructura de nivel superior como un mapa. JME está diseñado como una

herramienta de secuencias de comandos para el análisis de una sola vez de un conjunto de datos. (7)

- **OR:** operador booleano que localiza registros que contengan todos o cualquiera de los términos que se han especificado. Con este operador se suman los conjuntos definidos por dos palabras o sea la respuesta que se consigue son todas las referencias donde aparezcan de forma indistinta. (9)
- **Quimioinformática:** uso de técnicas informáticas y de computación, aplicadas a una variedad de problemas en el campo de la química. (3)
- **SMILES:** es una notación química que permite a un usuario para representar una estructura química de una manera que puede ser utilizada por el ordenador. (1)
- **Subestructura:** especificación de sitios abiertos o lista de átomos para una determinada posición en una estructura química. (3)

**ANEXOS**

## ANEXO N° 1.

### FLUJO DE TRABAJO TÍPICO DE DESCUBRIMIENTO DE PN Y PROYECTOS DE METABOLÓMICA.

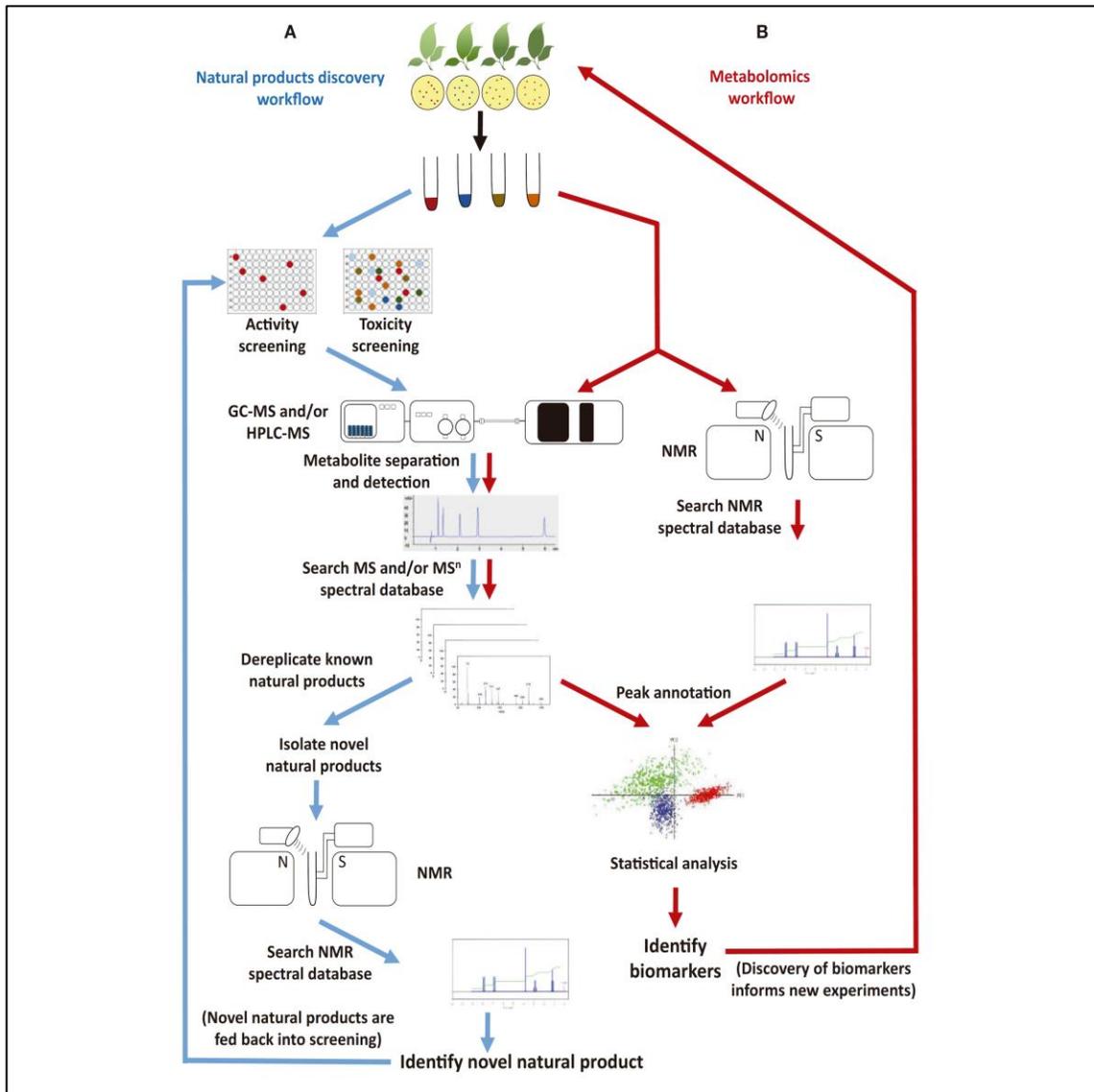


Figura N° 48. (A) Flujo de trabajo típico de descubrimiento de PN; (B) proyectos de metabolómica. Los objetivos comunes incluyen la identificación de metabolitos secundarios mediante la búsqueda y comparación de resultados en bases de datos espectrales RMN.

## ANEXO N° 2.

### DIAGRAMA COSTO VS TIEMPO: MÉTODO DE DESREPLICACIÓN CONVENCIONAL Y BASADA EN EL BÚSQUEDA Y COMPARACIÓN DE RESULTADOS EN BASES DE DATOS ESPECTRALES.

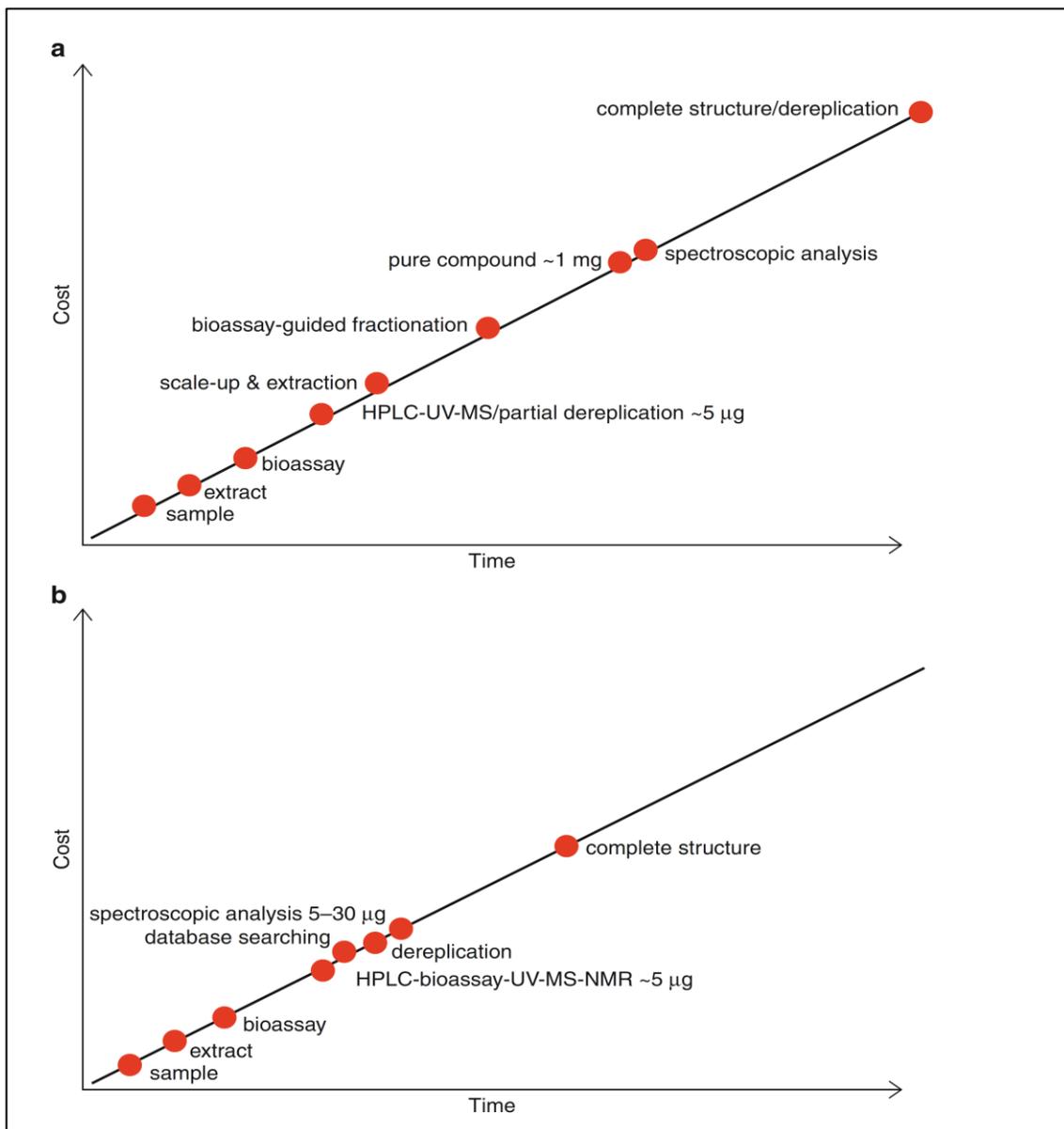


Figura N° 49. (a) Enfoque convencional para la desreplicación; (b) Desreplicación basada en el búsqueda y comparación de resultados en bases de datos espectrales RMN.

**ANEXO N° 3**

ESTRUCTURAS GENERADAS FAMILIA: ASTERACEAE

- Estructuras artículo clave: clave ph157\_145:

Propiedades			
Nombre Trivial: Caleanolenes B			
Nombre Sistemático:			
Familia : Terpenoids	Grupo : Sesquiterpenoids	Tipo : Bisabolanes	
Disolvente : CDCl <sub>3</sub>	Fórmula Molecular : C <sub>23</sub> H <sub>36</sub> O <sub>6</sub>	Peso molecular : 408.5305	
Bibliografía : Gogineni, V., Nael, M.A., Leon, F., Nuñez, M.J., Cutler, S.J. <i>Phytochemistry</i> (2019) 157, 145-50			
Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup> C			
Estructura			
Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH <sub>2</sub>	31.9
2	2	CH	129.4
3	3	C	135.3
4	4	CH	67.4
5	5	CH <sub>2</sub>	37.0
6	6	CH	38.6
7	7	C	150.9
8	8	CH <sub>2</sub>	37.4
9	9	CH	127.9
10	10	CH	135.1
11	11	C	72.0
12	12	CH <sub>3</sub>	24.9
13	13	CH <sub>2</sub>	70.8
14	14	CH <sub>2</sub>	109.8
15	15	CH <sub>2</sub>	65.3
1'	101	C	177.7
2'	102	CH	34.1
3'	103	CH <sub>3</sub>	19.0
4'	104	CH <sub>3</sub>	19.0
1"	201	C	177.4
2"	202	CH	34.0
3"	203	CH <sub>3</sub>	19.0
4"	204	CH <sub>3</sub>	19.0

Figura N° 50. Captura NAPROC-13: compuesto 2, clave ph157\_145\_2.

## Propiedades

Nombre Trivial: Caleanolenes C

Nombre Sistemático:

Familia :  
Terpenoids

Grupo : Sesquiterpenoids

Tipo : Bisabolanes

Disolvente : CDCl<sub>3</sub>

Fórmula Molecular :  
C<sub>23</sub>H<sub>34</sub>O<sub>8</sub>

Peso molecular :  
406.5145

Bibliografía : Gogineni, V., Nael, M.A., Leon, F., Nuñez, M.J., Cutler, S.J. *Phytochemistry* (2019) 157, 145-50

Desplazamientos Químicos RMN  
<sup>13</sup>C

Estructura

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH2	31.9
2	2	CH	146.7
3	3	C	134.5
4	4	C	197.6
5	5	CH2	43.2
6	6	CH	40.4
7	7	C	148.7
8	8	CH2	37.2
9	9	CH	127.3
10	10	CH	135.6
11	11	C	72.1
12	12	CH3	24.9
13	13	CH2	70.7
14	14	CH2	111.2
15	15	CH2	60.9
1'	101	C	177.6
2'	102	CH	34.0
3'	103	CH3	19.0
4'	104	CH3	19.0
1''	201	C	177.6
2''	202	CH	34.0
3''	203	CH3	19.0
4''	204	CH3	19.0

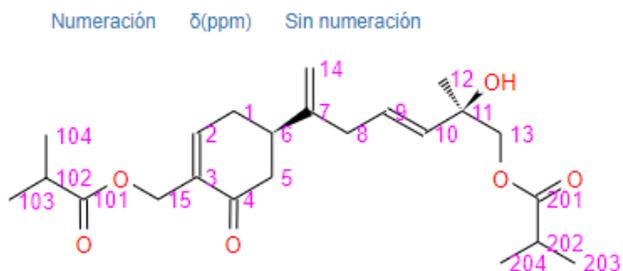


Figura N° 51. Captura NAPROC-13: compuesto 3, clave ph157\_145\_3.

- Estructuras artículo clave: ph04\_3107:

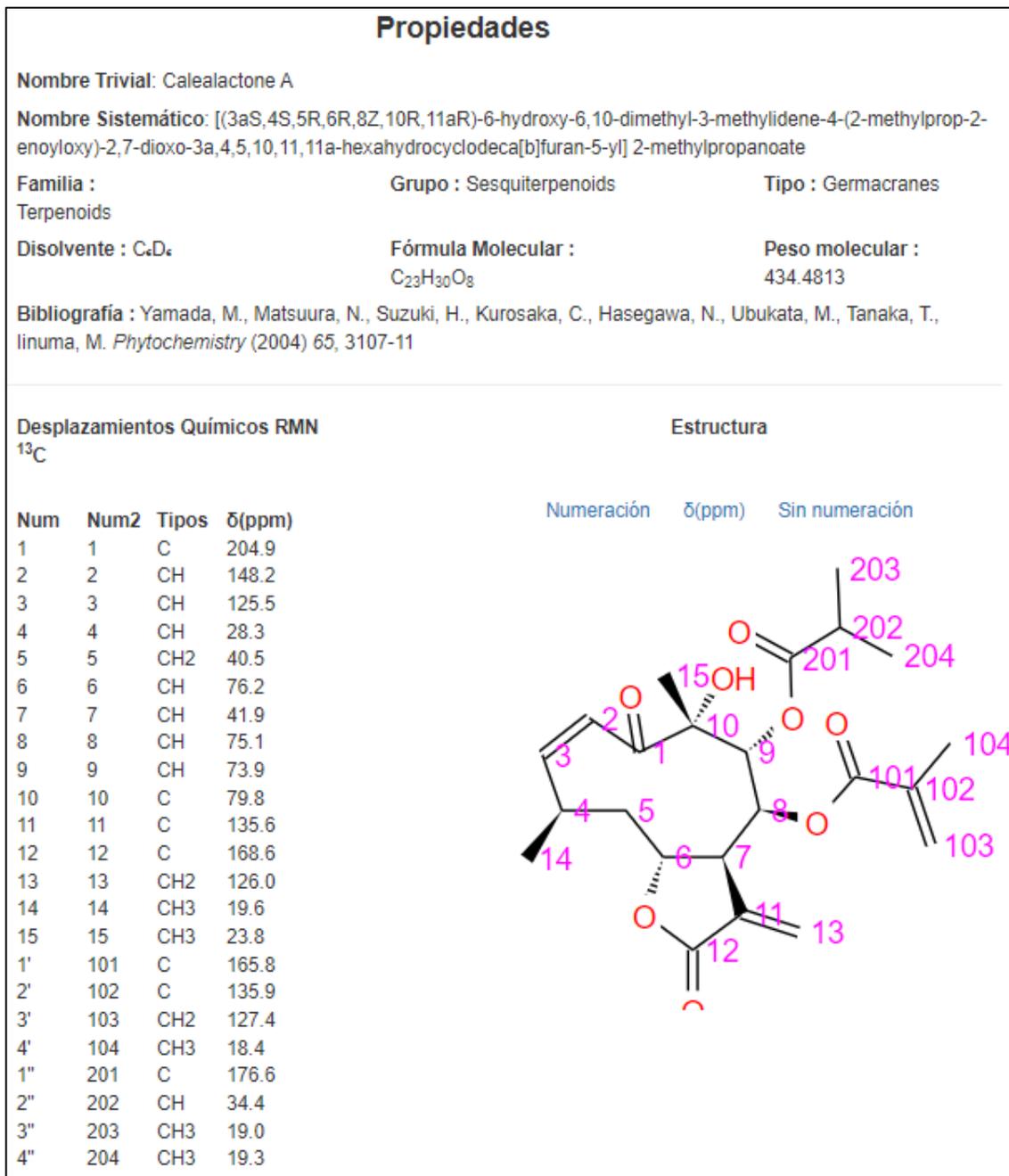


Figura N° 52. Captura NAPROC-13: compuesto 1, clave ph04\_3107\_1.

## Propiedades

**Nombre Trivial:** Calealactone B

**Nombre Sistemático:** [(1R,3R,4S,6S,8R,9R,10S,11S)-9-acetiloxi-8-hidroxi-3,8-dimetil-12-metiliden-7,13-dioxo-5,14-dioxatriciclo [9.3.0.04,6]tetradecan-10-il]2-metilprop-2-enoato

**Familia :**  
Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Germacranes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :**  
C<sub>21</sub>H<sub>26</sub>O<sub>9</sub>

**Peso molecular :**  
422.4273

**Bibliografía :** Yamada, M., Matsuura, N., Suzuki, H., Kurosaka, C., Hasegawa, N., Ubukata, M., Tanaka, T., Iinuma, M. *Phytochemistry* (2004) 65, 3107-11

**Desplazamientos Químicos RMN**  
<sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	C	206.0
2	2	CH	55.6
3	3	CH	62.8
4	4	CH	26.0
5	5	CH <sub>2</sub>	38.8
6	6	CH	74.6
7	7	CH	40.9
8	8	CH	73.9
9	9	CH	71.5
10	10	C	79.7
11	11	C	134.3
12	12	C	168.0
13	13	CH <sub>2</sub>	126.8
14	14	CH <sub>3</sub>	18.6
15	15	CH <sub>3</sub>	24.5
1'	101	C	165.2
2'	102	C	134.8
3'	103	CH <sub>2</sub>	127.3
4'	104	CH <sub>3</sub>	18.1
1''	201	C	170.4
2''	202	CH <sub>3</sub>	20.2

**Estructura**

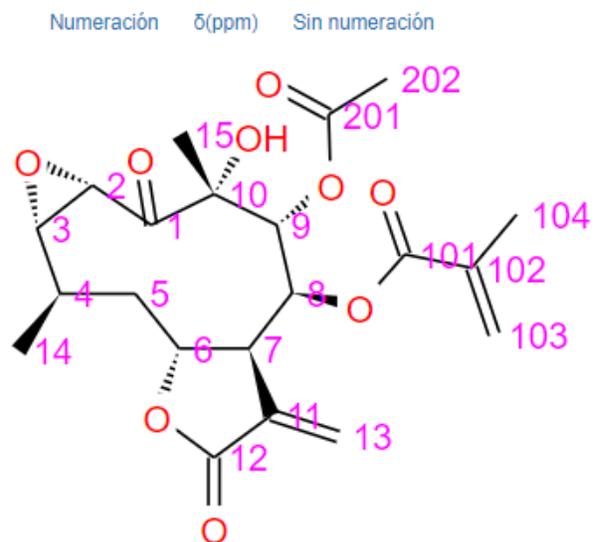


Figura N° 53. Captura NAPROC-13: compuesto 3, clave ph04\_3107\_3.

## Propiedades

**Nombre Trivial:** Calealactona C

**Nombre Sistemático:** [(3 a S , 4 S , 5 R , 6 R , 8 Z , 10 R , 11 a R ) -4-acetiloxi-6-hidroxi-6,10-dimetil-3-metiliden-2,7-dioxo-3 a , 4,5,10,11,11 a -hexahidrociclodeca [b] furan-5-il] 2-metilprop-2-enoato

**Familia :**  
Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Germacranes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :**  
C<sub>21</sub>H<sub>26</sub>O<sub>8</sub>

**Peso molecular :**  
406.4279

**Bibliografía :** Yamada, M., Matsuura, N., Suzuki, H., Kurosaka, C., Hasegawa, N., Ubukata, M., Tanaka, T., Iinuma, M. *Phytochemistry* (2004) 65, 3107-11

**Desplazamientos Químicos RMN**  
<sup>13</sup>C

**Estructura**

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	C	210.7
2	2	CH2	36.0
3	3	CH	121.5
4	4	C	136.6
5	5	CH2	35.9
6	6	CH	76.6
7	7	CH	42.0
8	8	CH	67.0
9	9	CH	72.5
10	10	C	80.3
11	11	C	134.1
12	12	C	168.1
13	13	CH2	124.4
14	14	CH3	25.4
15	15	CH3	22.3
1'	101	C	165.2
2'	102	C	135.1
3'	103	CH2	126.9
4'	104	CH3	18.1
1''	201	C	170.4
2''	202	CH3	20.4

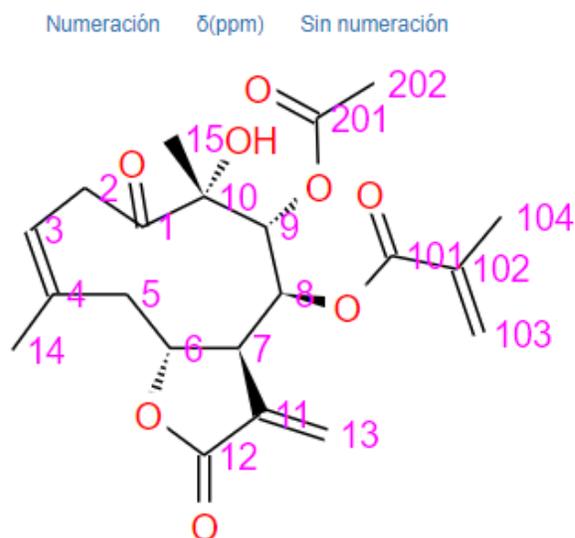


Figura N° 54. Captura NAPROC-13: compuesto 4, clave ph04\_3107\_4.

## Propiedades

**Nombre Trivial:** Calein D

**Nombre Sistemático:** [(3 a S , 4 S , 5 R , 6 R , 9 Z , 11 a R ) -5-acetiloxi-6-hidroxi-6,10-dimetil-3-metiliden-2,7-dioxo-3 a , 4,5,8,11,11 a -hexahidrociclodeca [b] furan-4-il] 2-metilprop-2-enoato

**Familia :**  
Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Germacranes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :**  
C<sub>21</sub>H<sub>28</sub>O<sub>8</sub>

**Peso molecular :**  
406.4279

**Bibliografía :** Yamada, M., Matsuura, N., Suzuki, H., Kurosaka, C., Hasegawa, N., Ubukata, M., Tanaka, T., Iinuma, M. *Phytochemistry* (2004) 65, 3107-11

**Desplazamientos Químicos RMN**  
<sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	C	204.7
2	2	CH	148.2
3	3	CH	125.3
4	4	CH	28.3
5	5	CH2	40.2
6	6	CH	76.3
7	7	CH	41.2
8	8	CH	74.4
9	9	CH	73.8
10	10	C	79.2
11	11	C	134.5
12	12	C	168.7
13	13	CH2	126.6
14	14	CH3	19.7
15	15	CH3	23.4
1'	101	C	170.3
2'	102	CH3	20.3
1''	201	C	165.3
2''	202	C	134.9
3''	203	CH3	18.0
4''	204	CH2	127.1

**Estructura**

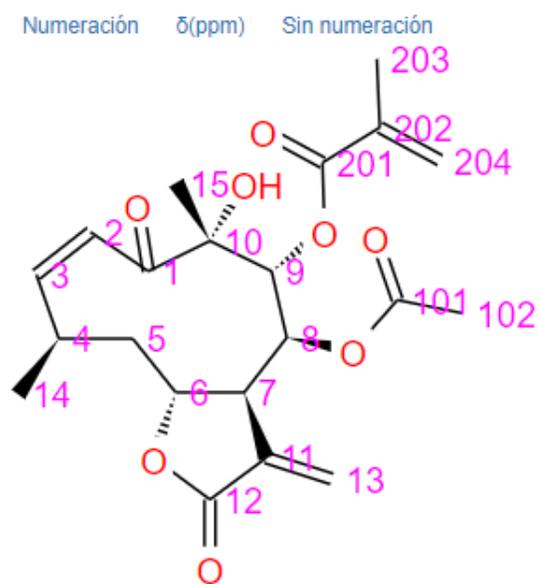


Figura N° 55. Captura NAPROC-13: compuesto 5, clave ph04\_3107\_5.

## Propiedades

**Nombre Trivial:** Juanislamin

**Nombre Sistemático:** [(3 a S , 4 S , 5 R , 6 R , 8 Z , 10 R , 11 a R ) -6-hidroxi-6,10-dimetil-3-metiliden-5-(2-metilprop-2-enoiloxi ) -2,7-dioxo-3 a , 4,5,10,11,11 a -hexahidrociclodeca [b] furan-4-il] 2-metilprop-2-enoato

**Familia :**  
Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Germacranes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :**  
C<sub>23</sub>H<sub>28</sub>O<sub>8</sub>

**Peso molecular :**  
432.4653

**Bibliografía :** Yamada, M., Matsuura, N., Suzuki, H., Kurosaka, C., Hasegawa, N., Ubukata, M., Tanaka, T., Iinuma, M. *Phytochemistry* (2004) 65, 3107-11

**Desplazamientos Químicos RMN**  
<sup>13</sup>C

**Estructura**

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	C	204.9
2	2	CH	148.1
3	3	CH	125.4
4	4	CH	28.3
5	5	CH2	40.3
6	6	CH	76.4
7	7	CH	41.2
8	8	CH	74.3
9	9	CH	74.0
10	10	C	79.4
11	11	C	134.6
12	12	C	168.8
13	13	CH2	126.5
14	14	CH3	19.7
15	15	CH3	23.6
1'	101	C	166.6
2'	102	C	134.7
3'	103	CH2	127.8
4'	104	CH3	18.0
1''	201	C	165.4
2''	202	C	134.9
3''	203	CH3	18.1
4''	204	CH2	126.9

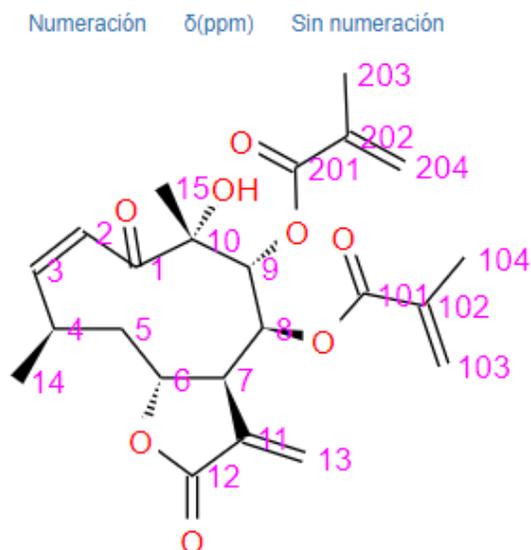


Figura N° 56. Captura NAPROC-13: compuesto 6, clave ph04\_3107\_6.

## Propiedades

**Nombre Trivial:** 2,3-epoxyjuanislamin

**Nombre Sistemático:** [8-hidroxi-3,8-dimetil-12-metiliden-9- (2-metilprop-2-enoiloxi) -7,13-dioxo-5,14-dioxatriciclo [9.3.0.04,6] tetradecan- 10-il] 2-metilprop-2-enoato

**Familia :**  
Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Germacranes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :**  
C<sub>23</sub>H<sub>28</sub>O<sub>9</sub>

**Peso molecular :**  
448.4647

**Bibliografía :** Yamada, M., Matsuura, N., Suzuki, H., Kurosaka, C., Hasegawa, N., Ubukata, M., Tanaka, T., Iinuma, M. *Phytochemistry* (2004) 65, 3107-11

### Desplazamientos Químicos RMN

<sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	C	206.1
2	2	CH	55.7
3	3	CH	62.8
4	4	CH	26.0
5	5	CH2	38.8
6	6	CH	74.7
7	7	CH	40.9
8	8	CH	73.8
9	9	CH	71.7
10	10	C	79.9
11	11	C	134.3
12	12	C	168.4
13	13	CH2	126.7
14	14	CH3	18.6
15	15	CH3	24.6
1'	101	C	165.4
2'	102	C	134.8
3'	103	CH2	127.0
4'	104	CH3	18.0
1''	201	C	166.7
2''	202	C	134.5
3''	203	CH3	18.0
4''	204	CH2	128.2

### Estructura

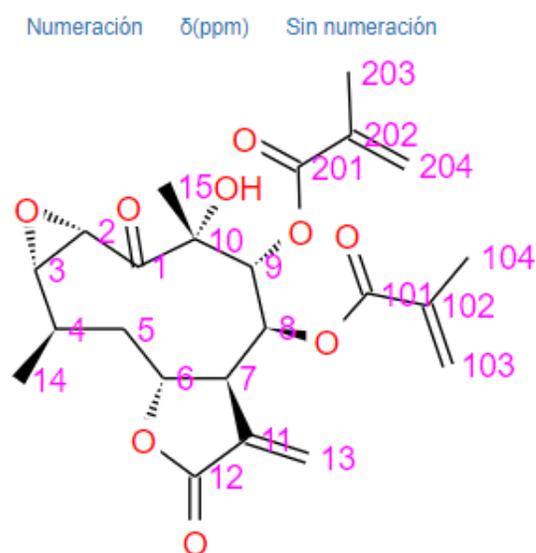


Figura N° 57. Captura NAPROC-13: compuesto 7, clave ph04\_3107\_7.

**ANEXO N° 4.**

ESTRUCTURAS GENERADAS FAMILIA: SOLANACEAE

- Estructuras artículo clave: np21\_2717:

Propiedades			
Nombre Trivial: Nicansteroidin B			
Nombre Sistemático:			
Familia : Steroids	Grupo : Ergostanes	Tipo : Withanolides	
Disolvente : CDCl <sub>3</sub>	Fórmula Molecular : C <sub>30</sub> H <sub>40</sub> O <sub>9</sub>	Peso molecular : 544.6356	
Bibliografía : Taddeo, V.A., Núñez, M.J., Beltran, M., Castillo, U.G., Menjivar, J., Jiménez, I.A., Alcamí, J., Bedoya, L.M., Bazzocchi, I.L. <i>J Nat Prod</i> (2021) 84, 2717-26			
Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup> C			Estructura
Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	C	203.1
2	2	CH	128.8
3	3	CH	144.8
4	4	CH <sub>2</sub>	32.9
5	5	C	62.0
6	6	CH	63.7
7	7	CH <sub>2</sub>	24.5
8	8	CH	35.3
9	9	CH	38.3
10	10	C	48.3
11	11	CH <sub>2</sub>	22.6
12	12	CH <sub>2</sub>	30.2
13	13	C	50.7
14	14	C	86.8
15	15	CH	79.5
16	16	CH <sub>2</sub>	47.9
17	17	C	86.1
18	18	CH <sub>3</sub>	14.5
19	19	CH <sub>3</sub>	15.0
20	20	CH	41.1
21	21	CH <sub>3</sub>	9.2
22	22	CH	75.2
23	23	CH <sub>2</sub>	34.3
24	24	C	80.2
25	25	C	136.7
26	26	C	165.7
27	27	CH <sub>2</sub>	132.3
28	28	CH <sub>3</sub>	23.4
15a	15001	C	169.4
15b	15002	CH <sub>3</sub>	21.4

Figura N° 58. Captura NAPROC-13: compuesto 2, clave np21\_2717\_2.

## Propiedades

Nombre Trivial: Nicansteroidin C

Nombre Sistemático:

Familia : Steroids

Grupo : Ergostanes

Tipo : Withanolides

Disolvente : CDCl<sub>3</sub>

Fórmula Molecular : C<sub>30</sub>H<sub>38</sub>O<sub>9</sub>

Peso molecular : 542.6196

Bibliografía : Taddeo, V.A., Núñez, M.J., Beltran, M., Castillo, U.G., Menjivar, J., Jiménez, I.A., Alcamí, J., Bedoya, L.M., Bazzocchi, I.L. *J Nat Prod* (2021) 84, 2717-26

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	C	206.8
2	2	CH	78.6
3	3	CH	126.3
4	4	CH	142.2
5	5	C	84.1
6	6	CH	67.0
7	7	CH <sub>2</sub>	27.9
8	8	CH	34.6
9	9	CH	38.2
10	10	C	48.5
11	11	CH <sub>2</sub>	21.9
12	12	CH <sub>2</sub>	38.5
13	13	C	52.3
14	14	C	82.2
15	15	CH	83.1
16	16	CH	120.6
17	17	C	161.5
18	18	CH <sub>3</sub>	16.7
19	19	CH <sub>3</sub>	19.0
20	20	CH	35.6
21	21	CH <sub>3</sub>	17.6
22	22	CH	78.9
23	23	CH <sub>2</sub>	32.8
24	24	C	150.3
25	25	C	121.8
26	26	C	167.7
27	27	CH <sub>3</sub>	12.5
28	28	CH <sub>3</sub>	20.8
15a	15001	C	170.6
15b	15002	CH <sub>3</sub>	21.3

### Estructura

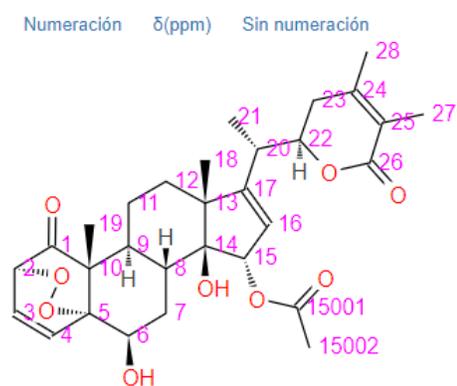


Figura N° 59. Captura NAPROC-13: compuesto 3, clave np21\_2717\_3

## Propiedades

**Nombre Trivial:** Nicansteroidin D

**Nombre Sistemático:**

**Familia :** Steroids

**Grupo :** Ergostanes

**Tipo :** Withanolides

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>30</sub>H<sub>38</sub>O<sub>10</sub>

**Peso molecular :** 558.619

**Bibliografía :** Taddeo, V.A., Núñez, M.J., Beltran, M., Castillo, U.G., Menjivar, J., Jiménez, I.A., Alcami, J., Bedoya, L.M., Bazzocchi, I.L. *J Nat Prod* (2021) 84, 2717-26

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	C	206.2
2	2	CH	78.8
3	3	CH	126.0
4	4	CH	141.9
5	5	C	83.9
6	6	CH	67.3
7	7	CH <sub>2</sub>	29.8
8	8	CH	34.4
9	9	CH	37.4
10	10	C	48.1
11	11	CH <sub>2</sub>	20.7
12	12	CH <sub>2</sub>	32.4
13	13	C	46.8
14	14	C	81.6
15	15	CH	76.8
16	16	CH	59.3
17	17	C	76.3
18	18	CH <sub>3</sub>	15.9
19	19	CH <sub>3</sub>	18.5
20	20	CH	33.5
21	21	CH <sub>3</sub>	13.5
22	22	CH	76.8
23	23	CH <sub>2</sub>	32.5
24	24	C	149.3
25	25	C	122.1
26	26	C	166.4
27	27	CH <sub>3</sub>	12.6
28	28	CH <sub>3</sub>	20.6
15a	15001	C	170.2
15b	15002	CH <sub>3</sub>	22.8

### Estructura

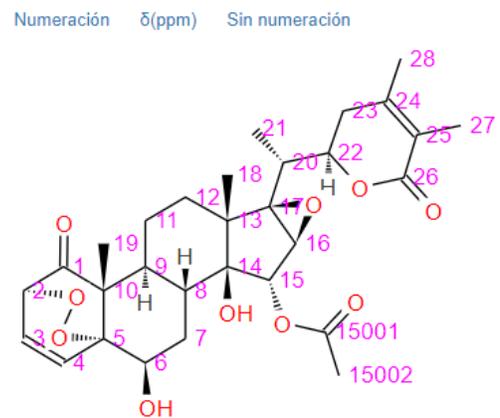


Figura N° 60. Captura NAPROC-13: compuesto 4, clave np21\_2717\_4

## Propiedades

**Nombre Trivial:** Physagulide I

**Nombre Sistemático:**

**Familia :** Steroids

**Grupo :** Ergostanes

**Tipo :** Withanolides

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>30</sub>H<sub>40</sub>O<sub>8</sub>

**Peso molecular :** 528.6362

**Bibliografía :** Taddeo, V.A., Núñez, M.J., Beltran, M., Castillo, U.G., Menjivar, J., Jiménez, I.A., Alcami, J., Bedoya, L.M., Bazzocchi, I.L. *J Nat Prod* (2021) 84, 2717-26

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	C	203.4
2	2	CH	129.2
3	3	CH	145.1
4	4	CH <sub>2</sub>	33.3
5	5	C	83.9
6	6	CH	62.2
7	7	CH <sub>2</sub>	24.8
8	8	CH	35.5
9	9	CH	38.6
10	10	C	48.7
11	11	CH <sub>2</sub>	22.8
12	12	CH <sub>2</sub>	30.3
13	13	C	50.8
14	14	C	87.1
15	15	CH	79.9
16	16	CH <sub>2</sub>	48.6
17	17	C	86.4
18	18	CH <sub>3</sub>	15.1
19	19	CH <sub>3</sub>	15.2
20	20	CH	42.2
21	21	CH <sub>3</sub>	10.0
22	22	CH	77.1
23	23	CH <sub>2</sub>	32.3
24	24	C	150.7
25	25	C	121.8
26	26	C	167.4
27	27	CH <sub>3</sub>	12.7
28	28	CH <sub>3</sub>	20.9
15a	15001	C	169.7
15b	15002	CH <sub>3</sub>	21.7

### Estructura

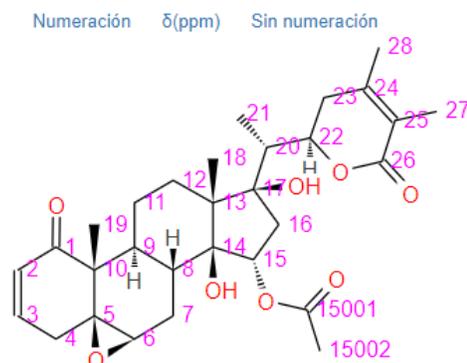


Figura N° 61. Captura NAPROC-13: compuesto 5, clave np21\_2717\_5

**ANEXO N° 5.**

ESTRUCTURAS GENERADAS FAMILIA: CELASTRACEAE

- Estructuras artículo clave: ph84\_116:

Propiedades			
<b>Nombre Trivial:</b>			
<b>Nombre Sistemático:</b> 7β-Hydroxy-3-oxo-D:A-friedooleanan-28-oic acid methyl ester			
<b>Familia :</b> Terpenoids	<b>Grupo :</b> Triterpenoids	<b>Tipo :</b> Friedelanes	
<b>Disolvente :</b> CDCl <sub>3</sub>	<b>Fórmula Molecular :</b> C <sub>31</sub> H <sub>50</sub> O <sub>4</sub>	<b>Peso molecular :</b> 486.7293	
<b>Bibliografía :</b> Ardiles, A.E., Gonzalez-Rodriguez, A., Nuñez, M.J., Perestelo, N.R., Pardo, V., Jimenez, I.A., Valverde, A.M., Bazzocchi, I.L. <i>Phytochemistry</i> (2012) 84, 116-24			
Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup> C		Estructura	
Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH2	22.4
2	2	CH2	41.7
3	3	C	212.7
4	4	CH	58.8
5	5	C	41.3
6	6	CH2	48.9
7	7	CH	68.3
8	8	CH	52.6
9	9	C	37.6
10	10	CH	59.8
11	11	CH2	31.2
12	12	CH2	37.5
13	13	C	39.5
14	14	C	44.9
15	15	CH2	32.8
16	16	CH2	29.1
17	17	C	38.3
18	18	CH	38.0
19	19	CH2	35.1
20	20	C	28.5
21	21	CH2	35.9
22	22	CH2	32.5
23	23	CH3	6.9
24	24	CH3	16.1
25	25	CH3	18.8
26	26	CH3	21.4
27	27	CH3	18.5
28	28	C	179.2
29	29	CH3	34.4
30	30	CH3	29.6
1'	101	CH3	51.9

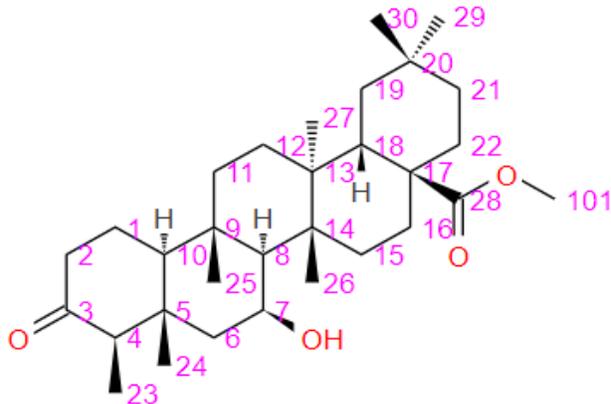


Figura N° 62. Captura NAPROC-13: compuesto 2, clave ph84\_116\_2.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** 7 $\beta$ ,29-Dihydroxy-3-oxo-D:A-friedooleanane

**Familia :**  
Terpenoids

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** Friedelanes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :**  
C<sub>30</sub>H<sub>50</sub>O<sub>3</sub>

**Peso molecular :**  
458.7192

**Bibliografía :** Ardiles, A.E., Gonzalez-Rodriguez, A., Nuñez, M.J., Perestelo, N.R., Pardo, V., Jimenez, I.A., Valverde, A.M., Bazzocchi, I.L. *Phytochemistry* (2012) 84, 116-24

**Desplazamientos Químicos RMN**  
<sup>13</sup>C

**Estructura**

Num	Num2	Tipos	$\delta$ (ppm)
1	1	CH2	22.3
2	2	CH2	41.7
3	3	C	212.8
4	4	CH	58.8
5	5	C	41.3
6	6	CH2	49.0
7	7	CH	68.4
8	8	CH	52.9
9	9	C	37.2
10	10	CH	60.0
11	11	CH2	37.6
12	12	CH2	30.5
13	13	C	40.4
14	14	C	39.1
15	15	CH2	32.4
16	16	CH2	35.8
17	17	C	30.5
18	18	CH	41.6
19	19	CH2	29.6
20	20	C	33.1
21	21	CH2	27.9
22	22	CH2	39.4
23	23	CH3	6.9
24	24	CH3	16.1
25	25	CH3	19.0
26	26	CH3	21.8
27	27	CH3	18.3
28	28	CH3	32.1
29	29	CH2	74.5
30	30	CH3	26.0

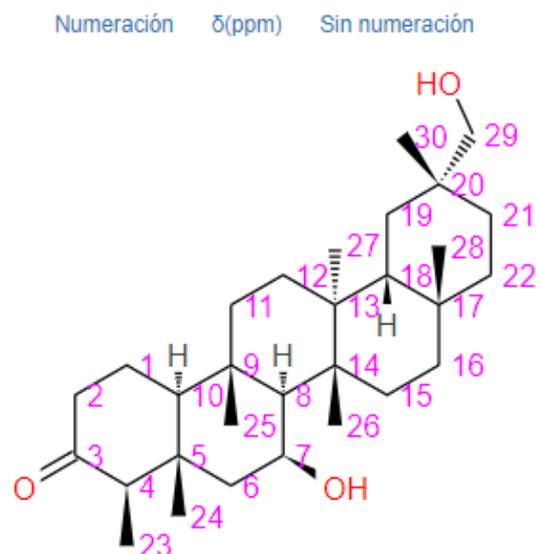


Figura N° 63. Captura NAPROC-13: compuesto 3, clave ph84\_116\_3.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** 7β,29-Dihydroxy-3-oxo-D:A-friedooleanane

**Familia :**  
Terpenoids

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** Friedelanes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :**  
C<sub>30</sub>H<sub>50</sub>O<sub>3</sub>

**Peso molecular :**  
458.7192

**Bibliografía :** Ardiles, A.E., Gonzalez-Rodriguez, A., Nuñez, M.J., Perestelo, N.R., Pardo, V., Jimenez, I.A., Valverde, A.M., Bazzocchi, I.L. *Phytochemistry* (2012) 84, 116-24

**Desplazamientos Químicos RMN**  
<sup>13</sup>C

**Estructura**

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	74.0
2	2	CH2	30.1
3	3	C	213.2
4	4	CH	53.3
5	5	C	42.7
6	6	CH2	41.2
7	7	CH2	18.2
8	8	CH	53.0
9	9	C	36.9
10	10	CH	52.4
11	11	CH2	35.9
12	12	CH2	30.5
13	13	C	39.8
14	14	C	38.4
15	15	CH2	32.1
16	16	CH2	35.4
17	17	C	30.0
18	18	CH	42.7
19	19	CH2	28.9
20	20	C	33.4
21	21	CH2	28.2
22	22	CH2	28.1
23	23	CH3	6.9
24	24	CH3	14.3
25	25	CH3	17.9
26	26	CH3	20.0
27	27	CH3	18.7
28	28	CH3	32.2
29	29	CH3	28.9
30	30	CH2	72.0

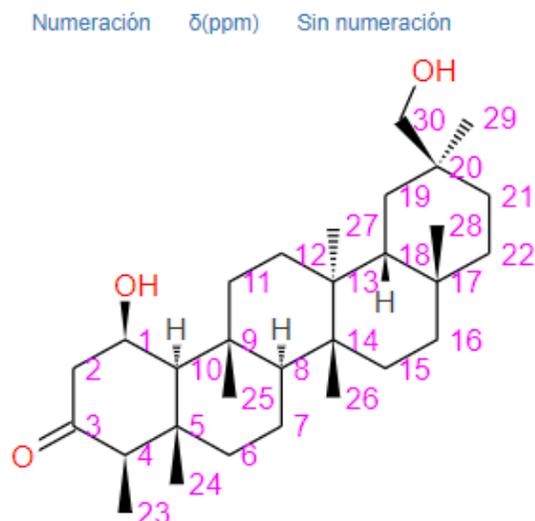


Figura N° 64. Captura NAPROC-13: compuesto 4, clave ph84\_116\_4.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** 1 $\beta$ -Hydroxy-3-oxo-D:A-friedooleanan-30-oic acid

**Familia :**  
Terpenoids

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** Friedelanes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :**  
C<sub>30</sub>H<sub>48</sub>O<sub>4</sub>

**Peso molecular :**  
472.7026

**Bibliografía :** Ardiles, A.E., Gonzalez-Rodriguez, A., Nuñez, M.J., Perestelo, N.R., Pardo, V., Jimenez, I.A., Valverde, A.M., Bazzocchi, I.L. *Phytochemistry* (2012) 84, 116-24

**Desplazamientos Químicos RMN**  
<sup>13</sup>C

**Estructura**

Num	Num2	Tipos	$\delta$ (ppm)
1	1	CH	74.0
2	2	CH2	29.7
3	3	C	213.2
4	4	CH	53.3
5	5	C	42.7
6	6	CH2	41.2
7	7	CH2	18.1
8	8	CH	53.1
9	9	C	36.9
10	10	CH	52.4
11	11	CH2	32.7
12	12	CH2	29.5
13	13	C	39.7
14	14	C	38.0
15	15	CH2	30.2
16	16	CH2	35.3
17	17	C	30.0
18	18	CH	42.4
19	19	CH2	31.3
20	20	C	40.2
21	21	CH2	28.2
22	22	CH2	38.2
23	23	CH3	6.8
24	24	CH3	14.3
25	25	CH3	17.5
26	26	CH3	20.9
27	27	CH3	17.7
28	28	CH3	32.0
29	29	CH3	31.8
30	30	C	183.1

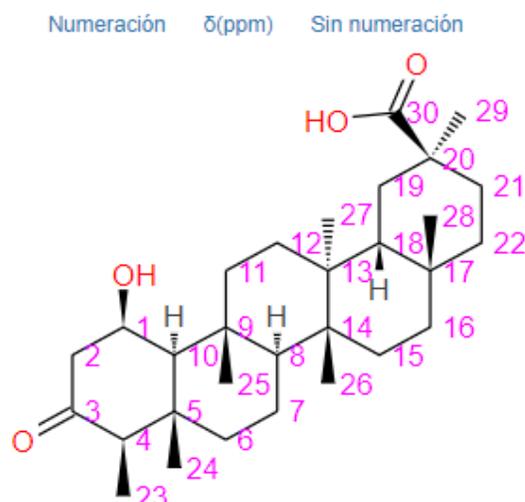


Figura N° 65. Captura NAPROC-13: compuesto 5, clave ph84\_116\_5.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** 2 $\alpha$ -Acetoxy-3 $\beta$ ,24-epoxy-3 $\alpha$ -hydroxy-D:A-friedooleanan-29-oic acid methyl ester

**Familia :**

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** Friedelanes

Terpenoids

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :**  
C<sub>33</sub>H<sub>52</sub>O<sub>6</sub>

**Peso molecular :**  
544.7655

**Bibliografía :** Ardiles, A.E., Gonzalez-Rodriguez, A., Nuñez, M.J., Perestelo, N.R., Pardo, V., Jimenez, I.A., Valverde, A.M., Bazzocchi, I.L. *Phytochemistry* (2012) 84, 116-24

**Desplazamientos Químicos RMN**  
<sup>13</sup>C

**Estructura**

Num	Num2	Tipos	$\delta$ (ppm)
1	1	CH2	25.9
2	2	CH	75.4
3	3	C	105.6
4	4	CH	47.4
5	5	C	46.8
6	6	CH2	33.3
7	7	CH2	19.2
8	8	CH	49.8
9	9	C	37.1
10	10	CH	53.2
11	11	CH2	34.3
12	12	CH2	29.0
13	13	C	39.2
14	14	C	39.1
15	15	CH2	29.1
16	16	CH2	36.2
17	17	C	30.1
18	18	CH	44.5
19	19	CH2	30.4
20	20	C	40.6
21	21	CH2	30.0
22	22	CH2	36.6
23	23	CH3	7.1
24	24	CH2	72.4
25	25	CH3	16.7
26	26	CH3	16.2
27	27	CH3	17.5
28	28	CH3	31.9
29	29	C	179.4
30	30	CH3	32.1
1'	101	C	172.1
2'	102	CH3	21.6
1''	201	CH3	51.6

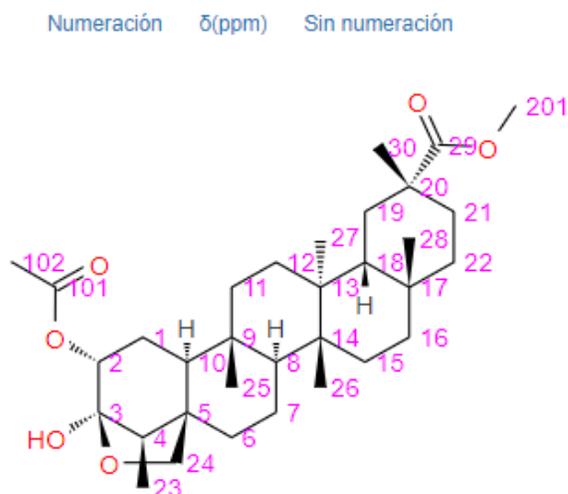


Figura N° 66. Captura NAPROC-13: compuesto 8, clave ph84\_116\_8.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** 3 $\alpha$ -Hydroxy-D:A-friedooleanan-28-oic acid

**Familia :**

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** Friedelanes

Terpenoids

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :**

**Peso molecular :**

C<sub>30</sub>H<sub>50</sub>O<sub>3</sub>

458.7192

**Bibliografía :** Ardiles, A.E., Gonzalez-Rodriguez, A., Nuñez, M.J., Perestelo, N.R., Pardo, V., Jimenez, I.A., Valverde, A.M., Bazzocchi, I.L. *Phytochemistry* (2012) 84, 116-24

### Desplazamientos Químicos RMN

<sup>13</sup>C

### Estructura

Num	Num2	Tipos	$\delta$ (ppm)
1	1	CH2	19.3
2	2	CH2	36.3
3	3	CH	71.9
4	4	CH	52.9
5	5	C	37.4
6	6	CH2	40.9
7	7	CH2	17.4
8	8	CH	52.6
9	9	C	37.0
10	10	CH	59.6
11	11	CH2	35.6
12	12	CH2	30.9
13	13	C	37.8
14	14	C	38.6
15	15	CH2	32.3
16	16	CH2	29.2
17	17	C	44.5
18	18	CH	37.6
19	19	CH2	34.5
20	20	C	28.2
21	21	CH2	35.1
22	22	CH2	32.2
23	23	CH3	9.6
24	24	CH3	14.3
25	25	CH3	17.4
26	26	CH3	20.3
27	27	CH3	18.3
28	28	C	183.7
29	29	CH3	34.2
30	30	CH3	29.5

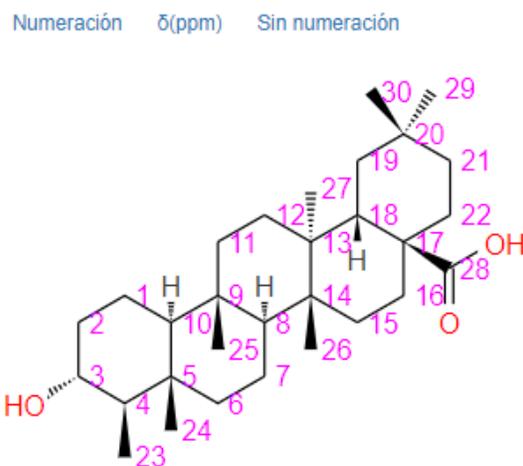


Figura N° 67. Captura NAPROC-13: compuesto 9, clave ph84\_116\_9.

- Estructuras artículo clave: np15\_1045:

Propiedades			
<b>Nombre Trivial:</b>			
<b>Nombre Sistemático:</b> β,30-Dihydroxylup-20(29)-en-3-one			
<b>Familia :</b> Terpenoids	<b>Grupo :</b> Triterpenoids	<b>Tipo :</b> Lupanes	
<b>Disolvente :</b> CDCl <sub>3</sub>	<b>Fórmula Molecular :</b> C <sub>30</sub> H <sub>48</sub> O <sub>3</sub>	<b>Peso molecular :</b> 456.7032	
<b>Bibliografía :</b> Callies, O., Bedoya, L.M., Beltrán, M., Muñoz, A., Calderón, P.O., Osorio, A.A., Jiménez, I.A., Alcamí, J., Bazzocchi, I.L. <i>J Nat Prod</i> (2015) 78, 1045-55			
Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup> C			
Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH2	42.1
2	2	CH2	34.4
3	3	C	216.7
4	4	C	48.9
5	5	CH	56.5
6	6	CH	69.6
7	7	CH2	42.2
8	8	C	40.0
9	9	CH	50.6
10	10	C	36.7
11	11	CH2	21.3
12	12	CH2	26.7
13	13	CH	37.1
14	14	C	42.9
15	15	CH2	27.4
16	16	CH2	35.3
17	17	C	43.1
18	18	CH	48.9
19	19	CH	43.7
20	20	C	154.6
21	21	CH2	31.7
22	22	CH2	39.8
23	23	CH3	25.0
24	24	CH3	23.7
25	25	CH3	17.0
26	26	CH3	17.1
27	27	CH3	14.8
28	28	CH3	17.7
29	29	CH2	106.9
30	30	CH2	65.0

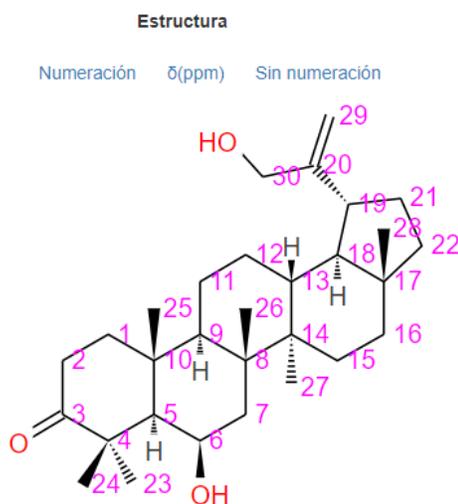


Figura N° 68. Captura NAPROC-13: compuesto 1, clave np15\_1045\_1.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:**  $\beta$ ,30-Dihydroxylup-20(29)-en-3-one

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** Lupanes

**Disolvente :**  $\text{CDCl}_3$

**Fórmula Molecular :**  $\text{C}_{30}\text{H}_{46}\text{O}_3$

**Peso molecular :** 454.6872

**Bibliografía :** Callies, O., Bedoya, L.M., Beltrán, M., Muñoz, A., Calderón, P.O., Osorio, A.A., Jiménez, I.A., Alcamí, J., Bazzocchi, I.L. *J Nat Prod* (2015) 78, 1045-55

### Desplazamientos Químicos RMN $^{13}\text{C}$

Num	Num2	Tipos	$\delta$ (ppm)
1	1	CH2	42.1
2	2	CH2	34.5
3	3	C	216.8
4	4	C	49.0
5	5	CH	56.6
6	6	CH	69.7
7	7	CH2	42.2
8	8	C	40.0
9	9	CH	50.5
10	10	C	36.7
11	11	CH2	21.3
12	12	CH2	29.7
13	13	CH	36.8
14	14	C	43.2
15	15	CH2	27.4
16	16	CH2	35.3
17	17	C	43.0
18	18	CH	50.6
19	19	CH	42.1
20	20	C	157.2
21	21	CH2	32.7
22	22	CH2	39.8
23	23	CH3	25.0
24	24	CH3	23.7
25	25	CH3	16.9
26	26	CH3	17.1
27	27	CH3	14.7
28	28	CH3	17.8
29	29	CH2	133.2
30	30	CH	195.1

### Estructura

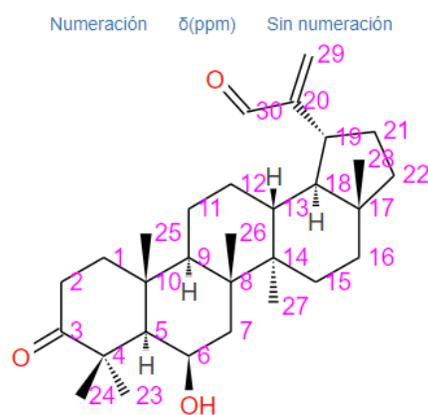


Figura N° 69. Captura NAPROC-13: compuesto 2, clave np15\_1045\_2.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** 3-Oxolup-20(29)-en-30-oic acid

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** Lupanes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>30</sub>H<sub>46</sub>O<sub>3</sub>

**Peso molecular :** 454.6872

**Bibliografía :** Callies, O., Bedoya, L.M., Beltrán, M., Muñoz, A., Calderón, P.O., Osorio, A.A., Jiménez, I.A., Alcamí, J., Bazzocchi, I.L. *J Nat Prod* (2015) 78, 1045-55

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH2	39.6
2	2	CH2	34.1
3	3	C	218.2
4	4	C	47.3
5	5	CH	54.9
6	6	CH2	19.6
7	7	CH2	33.6
8	8	C	40.7
9	9	CH	49.6
10	10	C	36.8
11	11	CH2	21.5
12	12	CH2	29.7
13	13	CH	37.8
14	14	C	42.8
15	15	CH2	27.3
16	16	CH2	35.4
17	17	C	43.1
18	18	CH	50.9
19	19	CH	40.7
20	20	C	146.3
21	21	CH2	32.9
22	22	CH2	39.7
23	23	CH3	26.6
24	24	CH3	21.0
25	25	CH3	15.9
26	26	CH3	15.8
27	27	CH3	14.4
28	28	CH3	17.9
29	29	CH2	124.9
30	30	C	171.2

### Estructura



Figura N° 70. Captura NAPROC-13: compuesto 3, clave np15\_1045\_3.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** 3 $\beta$ ,6 $\beta$ ,20-Trihydroxylupane

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** Lupanes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>30</sub>H<sub>52</sub>O<sub>3</sub>

**Peso molecular :** 460.7352

**Bibliografía :** Callies, O., Bedoya, L.M., Beltrán, M., Muñoz, A., Calderón, P.O., Osorio, A.A., Jiménez, I.A., Alcamí, J., Bazzocchi, I.L. *J Nat Prod* (2015) 78, 1045-55

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	$\delta$ (ppm)
1	1	CH2	40.7
2	2	CH2	27.6
3	3	CH	79.1
4	4	C	39.6
5	5	CH	55.5
6	6	CH	69.1
7	7	CH2	42.4
8	8	C	40.4
9	9	CH	50.9
10	10	C	36.6
11	11	CH2	21.6
12	12	CH2	28.8
13	13	CH	36.6
14	14	C	43.8
15	15	CH2	27.5
16	16	CH2	35.5
17	17	C	44.6
18	18	CH	48.4
19	19	CH	49.9
20	20	C	73.5
21	21	CH2	29.2
22	22	CH2	40.2
23	23	CH3	27.7
24	24	CH3	16.9
25	25	CH3	17.8
26	26	CH3	17.2
27	27	CH3	15.2
28	28	CH3	19.2
29	29	CH3	24.8
30	30	CH3	31.6

### Estructura

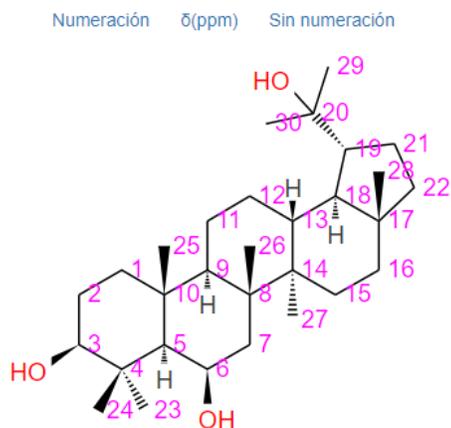


Figura N° 71. Captura NAPROC-13: compuesto 4, clave np15\_1045\_4.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** 1 $\beta$ ,3 $\alpha$ ,28-Trihydroxylup-20(29)-ene

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** Lupanes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>30</sub>H<sub>50</sub>O<sub>3</sub>

**Peso molecular :** 458.7192

**Bibliografía :** Callies, O., Bedoya, L.M., Beltrán, M., Muñoz, A., Calderón, P.O., Osorio, A.A., Jiménez, I.A., Alcamí, J., Bazzocchi, I.L. *J Nat Prod* (2015) 78, 1045-55

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	$\delta$ (ppm)
1	1	CH	75.9
2	2	CH <sub>2</sub>	36.4
3	3	CH	76.6
4	4	C	37.4
5	5	CH	47.8
6	6	CH <sub>2</sub>	18.4
7	7	CH <sub>2</sub>	34.0
8	8	C	42.9
9	9	CH	51.2
10	10	C	37.4
11	11	CH <sub>2</sub>	23.7
12	12	CH <sub>2</sub>	25.2
13	13	CH	36.9
14	14	C	41.7
15	15	CH <sub>2</sub>	27.1
16	16	CH <sub>2</sub>	29.2
17	17	C	43.6
18	18	CH	48.8
19	19	CH	47.8
20	20	C	150.3
21	21	CH <sub>2</sub>	29.7
22	22	CH <sub>2</sub>	34.0
23	23	CH <sub>3</sub>	27.7
24	24	CH <sub>3</sub>	21.9
25	25	CH <sub>3</sub>	11.7
26	26	CH <sub>3</sub>	16.2
27	27	CH <sub>3</sub>	14.8
28	28	CH <sub>2</sub>	60.6
29	29	CH <sub>2</sub>	109.8
30	30	CH <sub>3</sub>	19.0

### Estructura

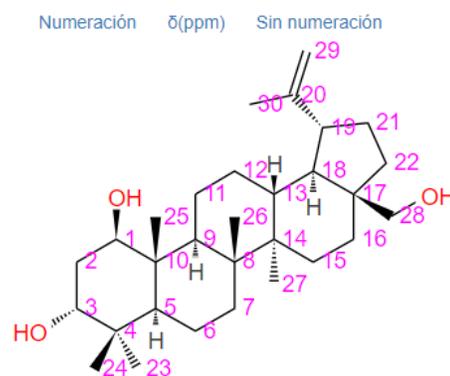


Figura N° 72. Captura NAPROC-13: compuesto 5, clave np15\_1045\_5.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** 11 $\alpha$ ,28-Dihydroxy-3-oxolup-20(29)-ene

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** Lupanes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>30</sub>H<sub>48</sub>O<sub>3</sub>

**Peso molecular :** 456.7032

**Bibliografía :** Callies, O., Bedoya, L.M., Beltrán, M., Muñoz, A., Calderón, P.O., Osorio, A.A., Jiménez, I.A., Alcamí, J., Bazzocchi, I.L. *J Nat Prod* (2015) 78, 1045-55

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	$\delta$ (ppm)
1	1	CH2	41.8
2	2	CH2	34.0
3	3	C	218.3
4	4	C	47.5
5	5	CH	54.6
6	6	CH2	19.4
7	7	CH2	33.9
8	8	C	42.2
9	9	CH	54.5
10	10	C	38.0
11	11	CH	70.1
12	12	CH2	37.2
13	13	CH	36.1
14	14	C	42.2
15	15	CH2	26.8
16	16	CH2	33.6
17	17	C	47.3
18	18	CH	47.8
19	19	CH	47.4
20	20	C	149.5
21	21	CH2	29.4
22	22	CH2	28.8
23	23	CH3	27.2
24	24	CH3	20.5
25	25	CH3	16.5
26	26	CH3	16.6
27	27	CH3	14.4
28	28	CH2	60.3
29	29	CH2	110.1
30	30	CH3	18.9

### Estructura

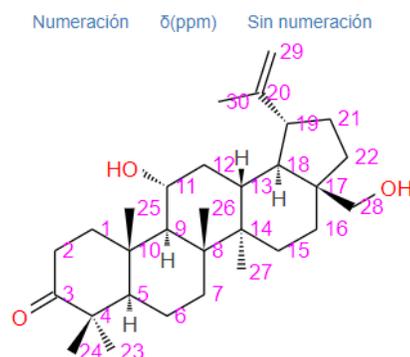


Figura N° 73. Captura NAPROC-13: compuesto 6, clave np15\_1045\_6.

- Estructuras artículo clave: ph17\_142:

Propiedades			
Nombre Trivial: Vulcanicoline-B			
Nombre Sistemático:			
Familia : Terpenoids	Grupo : Sesquiterpenoids	Tipo : Agarofurans	
Disolvente : CDCl <sub>3</sub>	Fórmula Molecular : C <sub>40</sub> H <sub>44</sub> N <sub>2</sub> O <sub>17</sub>	Peso molecular : 824.7832	
Bibliografía : Callies, O., Nuñez, M.J., Perestelo, N.R., Reyes, C.P., Torres-Romero, D., Jiménez, I.A., Bazzocchi, I.L. <i>Phytochemistry</i> (2017) 142, 21-9			
Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup> C			
Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	71.2
2	2	CH	69.6
3	3	CH	74.6
4	4	C	70.3
5	5	C	95.1
6	6	CH	73.3
7	7	CH	61.5
8	8	C	195.7
9	9	CH	78.0
10	10	C	51.9
11	11	C	85.7
12	12	CH <sub>2</sub>	69.8
13	13	CH <sub>3</sub>	19.4
14	14	CH <sub>2</sub>	24.0
15	15	CH <sub>3</sub>	60.5
2'	102	C	165.3
3'	103	C	124.3
4'	104	CH	137.6
5'	105	CH	121.0
6'	106	CH	151.5
7'	107	CH	36.1
8'	108	CH	44.7
9'	109	CH <sub>3</sub>	11.7
10'	110	CH <sub>3</sub>	9.6
11'	111	C	173.6
12'	112	C	168.2
1a	1001	C	168.8
1b	1002	CH <sub>3</sub>	19.9
2a	2001	C	163.1
2b	2002	C	130.6
2c	2003	CH	150.1
2d	2004	CH	153.6
2e	2005	CH	128.6
2f	2006	CH	137.0
6a	6001	C	169.1
6b	6002	CH <sub>3</sub>	21.2
9a	9001	C	169.1
9b	9002	CH <sub>3</sub>	19.4
14a	14001	C	169.6
14b	14002	CH <sub>3</sub>	20.2

**Estructura**

Numeración    δ(ppm)    Sin numeración

Figura N° 74. Captura NAPROC-13: compuesto 3, clave ph17\_142\_3.

## Propiedades

**Nombre Trivial:** Vulcanicoline-C

**Nombre Sistemático:**

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>48</sub>H<sub>51</sub>NO<sub>18</sub>

**Peso molecular :** 929.9175

**Bibliografía :** Callies, O., Nuñez, M.J., Perestelo, N.R., Reyes, C.P., Torres-Romero, D., Jiménez, I.A., Bazzocchi, I.L. *Phytochemistry* (2017) 142, 21-9

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	73.3
2	2	CH	68.9
3	3	CH	75.8
4	4	C	70.9
5	5	C	93.5
6	6	CH	75.6
7	7	CH	50.1
8	8	CH	69.2
9	9	CH	70.9
10	10	C	52.5
11	11	C	84.4
12	12	CH <sub>2</sub>	70.0
13	13	CH <sub>3</sub>	18.4
14	14	CH <sub>2</sub>	61.3
15	15	CH <sub>3</sub>	23.9
2'	102	C	165.0
3'	103	C	124.3
4'	104	CH	137.7
5'	105	CH	121.1
6'	106	CH	151.5
7'	107	CH	36.3
8'	108	CH	45.0
9'	109	CH <sub>3</sub>	11.9
10'	110	CH <sub>3</sub>	9.7
11'	111	C	173.9
12'	112	C	168.5
1a	1001	C	169.5
1b	1002	CH <sub>3</sub>	20.6
2a	2001	C	168.9
2b	2002	CH <sub>3</sub>	21.2
6a	6001	C	165.7
6b	6002	C	129.7
6c	6003	CH	130.4
6d	6004	CH	128.9
6e	6005	CH	133.7
6f	6006	CH	128.9
6g	6007	CH	130.4
8a	8001	C	170.5
8b	8002	CH <sub>3</sub>	20.5
9a	9001	C	169.0
9b	9002	CH <sub>3</sub>	20.5
14a	14001	C	166.0
14b	14002	C	129.3
14c	14003	CH	130.2
14d	14004	CH	128.6
14e	14005	CH	133.5
14f	14006	CH	128.6
14g	14007	CH	130.2

### Estructura

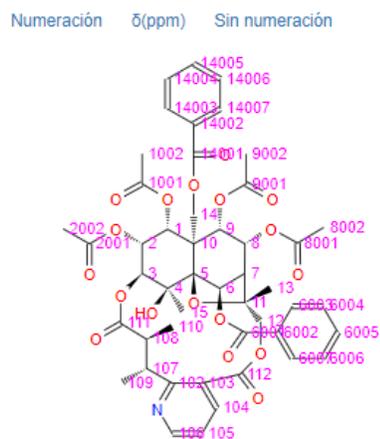


Figura N° 75. Captura NAPROC-13: compuesto 5, clave ph17\_142\_5.

- Estructuras artículo clave: np78\_736:

Propiedades			
<b>Nombre Trivial:</b>			
<b>Nombre Sistemático:</b> (1S,2S,4S,5R,6R,7R,8S,9S,10R)-1,6,15-Triacetoxo-2,9-dibenzoyloxy- 4,8-dihydroxydihidro-β-agarofuran			
<b>Familia :</b> Terpenoids	<b>Grupo :</b> Sesquiterpenoids	<b>Tipo :</b> Agarofurans	
<b>Disolvente :</b> CDCl <sub>3</sub>	<b>Fórmula Molecular :</b> C <sub>35</sub> H <sub>40</sub> O <sub>13</sub>	<b>Peso molecular :</b> 668.6867	
<b>Bibliografía :</b> Callies, O., Sánchez-Canete, M.P., Gamarro, F., Jiménez, I.A., Castanys, S., Bazzocchi, I.L. <i>J Nat Prod</i> (2015) 78, 736-45			
Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup> C			
Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	70.4
2	2	CH	68.8
3	3	CH <sub>2</sub>	42.1
4	4	C	69.6
5	5	C	90.8
6	6	CH	76.4
7	7	CH	55.1
8	8	CH	71.9
9	9	CH	70.9
10	10	C	53.7
11	11	C	85.0
12	12	CH <sub>3</sub>	30.2
13	13	CH <sub>3</sub>	26.2
14	14	CH <sub>2</sub>	65.6
15	15	CH <sub>3</sub>	25.2
1a	1001	C	169.2
1b	1002	CH <sub>3</sub>	20.3
2a	2001	C	165.6
2b	2002	C	129.2
2c	2003	CH	129.8
2d	2004	CH	128.7
2e	2005	CH	133.5
2f	2006	CH	128.7
2g	2007	CH	129.8
6a	6001	C	170.2
6b	6002	CH <sub>3</sub>	21.5
9a	9001	C	167.0
9b	9002	C	128.5
9c	9003	CH	130.4
9d	9004	CH	128.4
9e	9005	CH	133.0
9f	9006	CH	128.4
9g	9007	CH	130.4
14a	14001	C	170.5
14b	14002	CH <sub>3</sub>	21.3

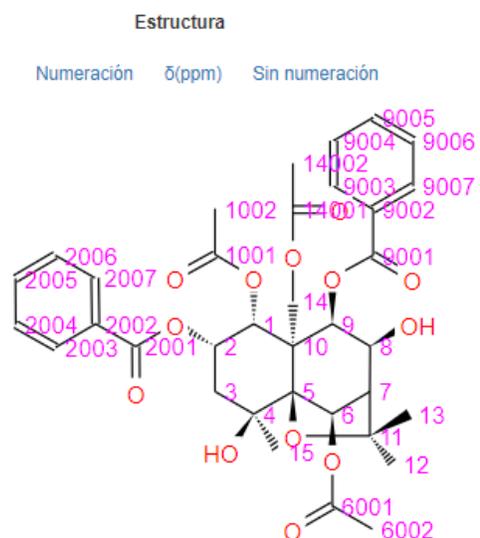


Figura N° 76. Captura NAPROC-13: compuesto 1, clave np78\_736\_1.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** (1S,2S,4S,5R,6R,7R,8S,9S,10R)-1,6,15-Triacetoxy-2,9-dibenzoyloxy- 4,8-dihydroxydihydro-β-agarofuran

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>42</sub>H<sub>44</sub>O<sub>14</sub>

**Peso molecular :** 772.793

**Bibliografía :** Callies, O., Sánchez-Canete, M.P., Gamarro, F., Jiménez, I.A., Castanys, S., Bazzocchi, I.L. *J Nat Prod* (2015) 78, 736-45

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	70.0
2	2	CH	68.8
3	3	CH <sub>2</sub>	42.1
4	4	C	69.6
5	5	C	91.1
6	6	CH	75.9
7	7	CH	53.8
8	8	CH	70.7
9	9	CH	68.1
10	10	C	53.9
11	11	C	85.0
12	12	CH <sub>3</sub>	30.0
13	13	CH <sub>3</sub>	26.6
14	14	CH <sub>2</sub>	65.2
15	15	CH <sub>3</sub>	25.3
1a	1001	C	169.3
1b	1002	CH <sub>3</sub>	20.3
2a	2001	C	165.7
2b	2002	C	129.2
2c	2003	CH	129.8
2d	2004	CH	128.8
2e	2005	CH	133.5
2f	2006	CH	128.8
2g	2007	CH	129.8
6a	6001	C	169.9
6b	6002	CH <sub>3</sub>	21.4
8a	8001	C	164.8
8b	8002	C	129.1
8c	8003	CH	129.6
8d	8004	CH	128.3
8e	8005	CH	133.2
8f	8006	CH	128.3
8g	8007	CH	129.6
9a	9001	C	165.4
9b	9002	C	128.8
9c	9003	CH	130.3
9d	9004	CH	128.3
9e	9005	CH	133.2
9f	9006	CH	128.3
9g	9007	CH	130.3
14a	14001	C	170.7
14b	14002	CH <sub>3</sub>	21.3

### Estructura

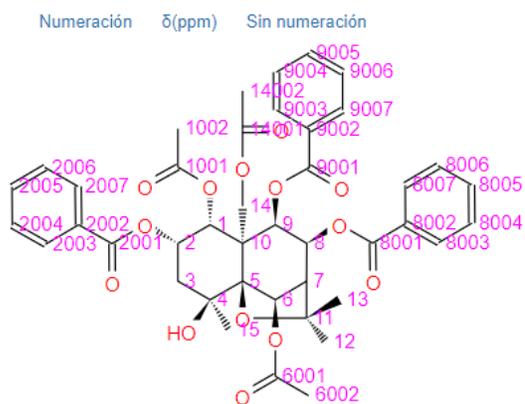


Figura N° 77. Captura NAPROC-13: compuesto 1a, clave np78\_736\_1a.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** (1S,2S,4S,5R,6R,7R,8S,9S,10S)-1,6,8,15-Tetraacetoxy 2,9-dibenzoyloxy- 4-hydroxydihydro-β-agarofuran

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>37</sub>H<sub>42</sub>O<sub>14</sub>

**Peso molecular :** 710.7235

**Bibliografía :** Callies, O., Sánchez-Canete, M.P., Gamarro, F., Jiménez, I.A., Castanys, S., Bazzocchi, I.L. *J Nat Prod* (2015) 78, 736-45

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	70.1
2	2	CH	68.8
3	3	CH2	42.1
4	4	C	69.6
5	5	C	91.0
6	6	CH	76.1
7	7	CH	53.8
8	8	CH	70.1
9	9	CH	68.1
10	10	C	53.7
11	11	C	85.0
12	12	CH3	30.0
13	13	CH3	26.3
14	14	CH2	65.1
15	15	CH3	25.3
1a	1001	C	169.2
1b	1002	CH3	20.3
2a	2001	C	165.7
2b	2002	C	129.2
2c	2003	CH	129.8
2d	2004	CH	128.7
2e	2005	CH	133.5
2f	2006	CH	128.7
2g	2007	CH	129.8
6a	6001	C	170.0
6b	6002	CH3	21.4
8a	8001	C	169.3
8b	8002	CH3	20.7
9a	9001	C	165.5
9b	9002	C	128.6
9c	9003	CH	130.3
9d	9004	CH	128.4
9e	9005	CH	133.7
9f	9006	CH	128.4
9g	9007	CH	130.3
14a	14001	C	170.7
14b	14002	CH3	21.1

### Estructura

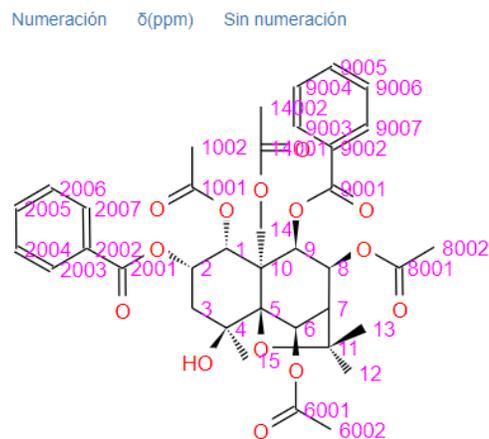


Figura N° 78. Captura NAPROC-13: compuesto 2, clave np78\_736\_2.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** (1S,2S,4S,5R,6R,7R,8S,9S,10S)-1,2,8,15-Tetraacetoxo-6,9-dibenzoyloxy-4-hydroxydihidro-β-agarofuran

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>37</sub>H<sub>42</sub>O<sub>14</sub>

**Peso molecular :** 710.7235

**Bibliografía :** Callies, O., Sánchez-Canete, M.P., Gamarro, F., Jiménez, I.A., Castanys, S., Bazzocchi, I.L. *J Nat Prod* (2015) 78, 736-45

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	70.1
2	2	CH	68.0
3	3	CH2	42.3
4	4	C	69.9
5	5	C	90.9
6	6	CH	76.8
7	7	CH	53.7
8	8	CH	70.0
9	9	CH	68.1
10	10	C	53.9
11	11	C	85.0
12	12	CH3	30.1
13	13	CH3	26.3
14	14	CH2	64.4
15	15	CH3	24.9
1a	1001	C	169.2
1b	1002	CH3	20.2
2a	2001	C	169.6
2b	2002	CH3	21.1
6a	6001	C	165.7
6b	6002	C	129.4
6c	6003	CH	130.1
6d	6004	CH	128.7
6e	6005	CH	133.5
6f	6006	CH	128.7
6g	6007	CH	130.1
8a	8001	C	169.3
8b	8002	CH3	20.6
9a	9001	C	165.4
9b	9002	C	128.6
9c	9003	CH	130.3
9d	9004	CH	128.4
9e	9005	CH	133.7
9f	9006	CH	128.4
9g	9007	CH	130.3
14a	14001	C	170.6
14b	14002	CH3	21.3

### Estructura

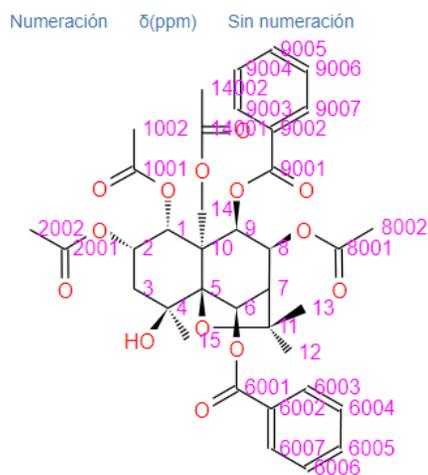


Figura N° 79. Captura NAPROC-13: compuesto 3, clave np78\_736\_3.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** (1S,2S,4S,5R,6R,7S,8S,9S,10S)-1,2-Diacetoxy-9-benzoyloxy-8-(E)-cinnamoyloxy-4,6-dihydroxydihydro-β-agarofuran

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>35</sub>H<sub>40</sub>O<sub>11</sub>

**Peso molecular :** 636.6879

**Bibliografía :** Callies, O., Sánchez-Canete, M.P., Gamarro, F., Jiménez, I.A., Castanys, S., Bazzocchi, I.L. *J Nat Prod* (2015) 78, 736-45

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	74.2
2	2	CH	62.5
3	3	CH <sub>2</sub>	42.3
4	4	C	69.9
5	5	C	92.2
6	6	CH	76.0
7	7	CH	52.5
8	8	CH	71.5
9	9	CH	74.4
10	10	C	50.7
11	11	C	83.2
12	12	CH <sub>3</sub>	29.5
13	13	CH <sub>3</sub>	23.8
14	14	CH <sub>3</sub>	13.2
15	15	CH <sub>3</sub>	24.8
1a	1001	C	169.6
1b	1002	CH <sub>3</sub>	20.3
2a	2001	C	169.7
2b	2002	CH <sub>3</sub>	21.2
8a	8001	C	165.0
8b	8002	CH	117.1
8c	8003	CH	145.6
8d	8004	C	133.9
8e	8005	CH	128.4
8f	8006	CH	128.1
8g	8007	CH	130.3
8h	8008	CH	128.1
8i	8009	CH	128.4
9a	9001	C	165.4
9b	9002	C	129.8
9c	9003	CH	130.5
9d	9004	CH	128.7
9e	9005	CH	133.4
9f	9006	CH	128.7
9g	9007	CH	130.5

### Estructura

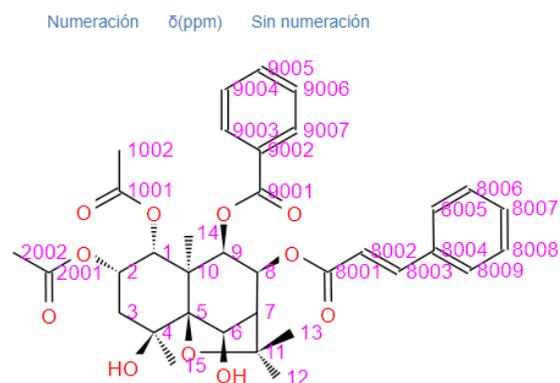


Figura N° 80. Captura NAPROC-13: compuesto 4, clave np78\_736\_4.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** (1S,2S,4S,5R,6R,7R,8S,9S,10S)-2,8-Diacetoxy-6,9-dibenzoyloxy-1,4-dihydroxydihydro-β-agarofuran

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>33</sub>H<sub>38</sub>O<sub>11</sub>

**Peso molecular :** 610.6505

**Bibliografía :** Callies, O., Sánchez-Canete, M.P., Gamarro, F., Jiménez, I.A., Castanys, S., Bazzocchi, I.L. *J Nat Prod* (2015) 78, 736-45

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	69.8
2	2	CH	68.2
3	3	CH2	40.9
4	4	C	72.4
5	5	C	91.1
6	6	CH	77.9
7	7	CH	54.9
8	8	CH	69.0
9	9	CH	72.0
10	10	C	48.9
11	11	C	85.0
12	12	CH3	30.6
13	13	CH3	27.2
14	14	CH3	21.4
15	15	CH3	25.0
2a	2001	C	170.9
2b	2002	CH3	21.3
6a	6001	C	165.8
6b	6002	C	130.0
6c	6003	CH	130.1
6d	6004	CH	128.7
6e	6005	CH	133.4
6f	6006	CH	128.7
6g	6007	CH	130.1
8a	8001	C	170.1
8b	8002	CH3	21.0
9a	9001	C	165.7
9b	9002	C	129.7
9c	9003	CH	129.6
9d	9004	CH	128.5
9e	9005	CH	133.2
9f	9006	CH	128.5
9g	9007	CH	129.6

### Estructura

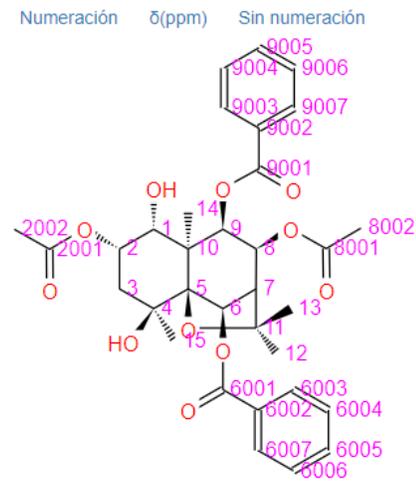


Figura N° 81. Captura NAPROC-13: compuesto 5, clave np78\_736\_5.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** (1S,4S,5R,6R,7R,8S,9S,10S)-1,6-Diacetoxy-9-benzoyloxy-8-(Z)-cinnamoyloxy-4-hydroxydihydro-β-agarofuran

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>35</sub>H<sub>40</sub>O<sub>10</sub>

**Peso molecular :** 620.6885

**Bibliografía :** Callies, O., Sánchez-Canete, M.P., Gamarro, F., Jiménez, I.A., Castanys, S., Bazzocchi, I.L. *J Nat Prod* (2015) 78, 736-45

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	72.3
2	2	CH2	23.2
3	3	CH2	38.5
4	4	C	70.4
5	5	C	91.3
6	6	CH	77.5
7	7	CH	53.7
8	8	CH	68.7
9	9	CH	72.2
10	10	C	49.9
11	11	C	84.7
12	12	CH3	30.2
13	13	CH3	26.2
14	14	CH3	19.6
15	15	CH3	23.9
1a	1001	C	169.9
1b	1002	CH3	20.8
6a	6001	C	170.0
6b	6002	CH3	21.5
8a	8001	C	164.0
8b	8002	CH	118.5
8c	8003	CH	145.1
8d	8004	C	134.6
8e	8005	CH	128.3
8f	8006	CH	128.0
8g	8007	CH	129.2
8h	8008	CH	128.0
8i	8009	CH	128.3
9a	9001	C	165.5
9b	9002	C	129.3
9c	9003	CH	130.2
9d	9004	CH	129.9
9e	9005	CH	133.3
9f	9006	CH	129.9
9g	9007	CH	130.2

### Estructura

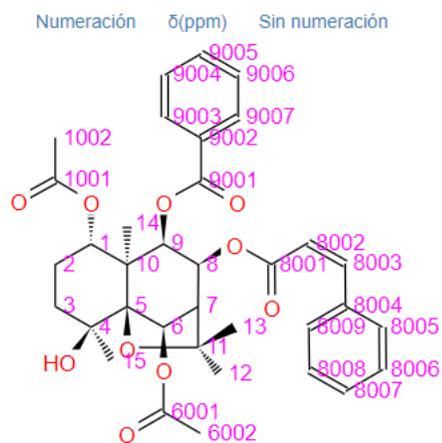


Figura N° 82. Captura NAPROC-13: compuesto 6, clave np78\_736\_6.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** (1S,2S,4R,5R,6R,7R,9S,10R)-1-Acetoxy-2,9-dibenzoyloxy-6-nicotinoyloxydihydro-β-agarofuran

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>37</sub>H<sub>39</sub>NO<sub>9</sub>

**Peso molecular :** 641.7092

**Bibliografía :** Callies, O., Sánchez-Canete, M.P., Gamarro, F., Jiménez, I.A., Castanys, S., Bazzocchi, I.L. *J Nat Prod* (2015) 78, 736-45

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	71.2
2	2	CH	70.6
3	3	CH <sub>2</sub>	31.1
4	4	CH	34.0
5	5	C	89.7
6	6	CH	80.5
7	7	CH	49.0
8	8	CH <sub>2</sub>	31.8
9	9	CH	72.9
10	10	C	50.0
11	11	C	83.0
12	12	CH <sub>3</sub>	30.9
13	13	CH <sub>3</sub>	26.0
14	14	CH <sub>3</sub>	20.8
15	15	CH <sub>3</sub>	19.1
1a	1001	C	169.7
1b	1002	CH <sub>3</sub>	20.4
2a	2001	C	166.1
2b	2002	C	130.2
2c	2003	CH	129.5
2d	2004	CH	128.3
2e	2005	CH	133.0
2f	2006	CH	128.3
2g	2007	CH	129.5
6a	6001	C	164.5
6b	6002	C	125.8
6c	6003	CH	150.8
6d	6004	CH	154.0
6e	6005	CH	123.6
6f	6006	CH	137.0
9a	9001	C	165.5
9b	9002	C	129.3
9c	9003	CH	130.1
9d	9004	CH	128.5
9e	9005	CH	133.4
9f	9006	CH	128.5
9g	9007	CH	130.1

### Estructura

Numeración    δ(ppm)    Sin numeración

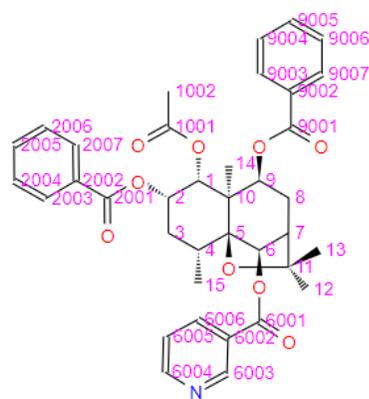


Figura N° 83. Captura NAPROC-13: compuesto 7, clave np78\_736\_7.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** (1S,2S,4S,5R,6R,7R,8R,9R,10S)-1,8-Diacetoxy-6,9-dibenzyloxy-2,4-dihydroxydihydro-β-agarofuran

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>33</sub>H<sub>38</sub>O<sub>11</sub>

**Peso molecular :** 610.6505

**Bibliografía :** Callies, O., Sánchez-Canete, M.P., Gamarro, F., Jiménez, I.A., Castanys, S., Bazzocchi, I.L. *J Nat Prod* (2015) 78, 736-45

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	77.4
2	2	CH	68.9
3	3	CH2	44.0
4	4	C	69.9
5	5	C	92.7
6	6	CH	75.9
7	7	CH	52.4
8	8	CH	70.9
9	9	CH	74.8
10	10	C	50.1
11	11	C	83.3
12	12	CH3	29.5
13	13	CH3	23.9
14	14	CH3	15.0
15	15	CH3	25.2
1a	1001	C	169.8
1b	1002	CH3	20.7
6a	6001	C	165.9
6b	6002	C	129.7
6c	6003	CH	130.1
6d	6004	CH	128.6
6e	6005	CH	133.4
6f	6006	CH	128.6
6g	6007	CH	130.1
8a	8001	C	169.9
8b	8002	CH3	21.0
9a	9001	C	164.9
9b	9002	C	129.8
9c	9003	CH	129.5
9d	9004	CH	128.7
9e	9005	CH	133.5
9f	9006	CH	128.7
9g	9007	CH	129.5

### Estructura

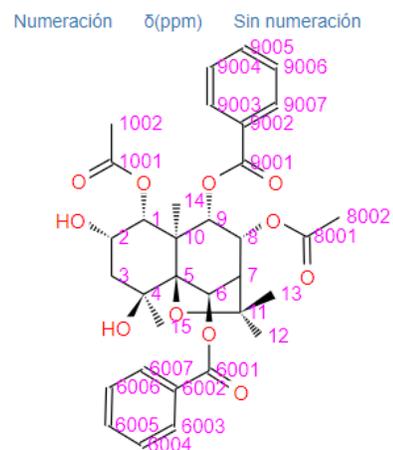


Figura N° 84. Captura NAPROC-13: compuesto 8, clave np78\_736\_8.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** (1S,2S,4S,5R,6R,7R,8R,9R,10S)-1,8-Diacetoxy-2,6,9-tribenzoyloxy-4-hydroxydihydro-β-agarofuran

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>40</sub>H<sub>42</sub>O<sub>12</sub>

**Peso molecular :** 714.7568

**Bibliografía :** Callies, O., Sánchez-Canete, M.P., Gamarro, F., Jiménez, I.A., Castanys, S., Bazzocchi, I.L. *J Nat Prod* (2015) 78, 736-45

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	75.3
2	2	CH	69.4
3	3	CH2	42.6
4	4	C	69.8
5	5	C	92.3
6	6	CH	75.8
7	7	CH	52.5
8	8	CH	71.1
9	9	CH	74.2
10	10	C	49.9
11	11	C	83.6
12	12	CH3	29.5
13	13	CH3	23.9
14	14	CH3	14.9
15	15	CH3	25.2
1a	1001	C	170.0
1b	1002	CH3	20.4
2a	2001	C	165.6
2b	2002	C	128.8
2c	2003	CH	129.5
2d	2004	CH	128.6
2e	2005	CH	133.2
2f	2006	CH	128.6
2g	2007	CH	129.5
6a	6001	C	165.9
6b	6002	C	129.6
6c	6003	CH	130.1
6d	6004	CH	128.9
6e	6005	CH	133.4
6f	6006	CH	128.6
6g	6007	CH	130.1
8a	8001	C	169.9
8b	8002	CH3	21.0
9a	9001	C	164.9
9b	9002	C	129.9
9c	9003	CH	129.5
9d	9004	CH	128.7
9e	9005	CH	133.5
9f	9006	CH	128.7
9g	9007	CH	129.5

### Estructura

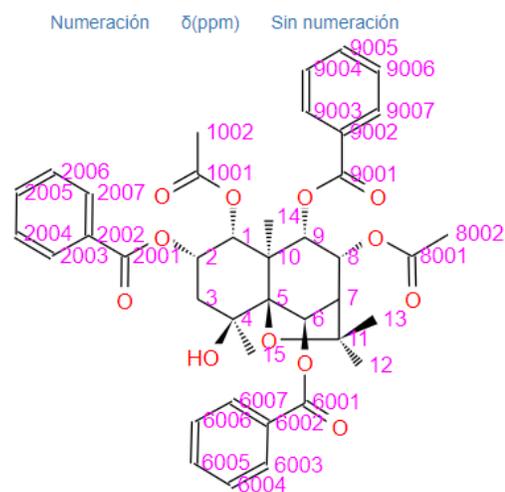


Figura N° 85. Captura NAPROC-13: compuesto 8a, clave np78\_736\_8a.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** (1S,2S,4S,5R,6R,7R,8R,9R,10S)-1,8-Diacetoxy-2,9-dibenzoxyloxy-4,6-dihydroxydihydro-β-agarofuran

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>33</sub>H<sub>38</sub>O<sub>11</sub>

**Peso molecular :** 610.6505

**Bibliografía :** Callies, O., Sánchez-Canete, M.P., Gamarro, F., Jiménez, I.A., Castanys, S., Bazzocchi, I.L. *J Nat Prod* (2015) 78, 736-45

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	74.5
2	2	CH	68.2
3	3	CH2	41.2
4	4	C	71.6
5	5	C	91.8
6	6	CH	75.2
7	7	CH	53.8
8	8	CH	69.1
9	9	CH	74.1
10	10	C	48.2
11	11	C	83.3
12	12	CH3	29.5
13	13	CH3	24.0
14	14	CH3	14.2
15	15	CH3	24.8
1a	1001	C	169.7
1b	1002	CH3	20.5
2a	2001	C	165.1
2b	2002	C	128.8
2c	2003	CH	129.5
2d	2004	CH	128.6
2e	2005	CH	133.3
2f	2006	CH	128.6
2g	2007	CH	129.5
8a	8001	C	169.0
8b	8002	CH3	20.9
9a	9001	C	164.3
9b	9002	C	129.7
9c	9003	CH	129.6
9d	9004	CH	128.7
9e	9005	CH	133.4
9f	9006	CH	128.7
9g	9007	CH	129.6

### Estructura

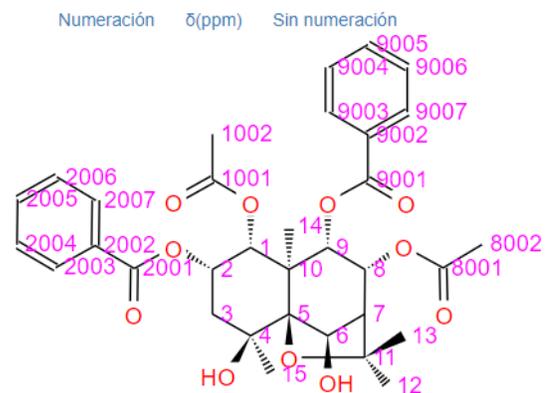


Figura N° 86. Captura NAPROC-13: compuesto 8b, clave np78\_736\_8b.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** (1S,2S,4S,5R,7S,8R,9R,10S)-2,8-Diacetoxy-9-benzoyloxy-1,4-dihydroxydihydro- $\beta$ -agarofuran

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>28</sub>H<sub>34</sub>O<sub>9</sub>

**Peso molecular :** 490.5448

**Bibliografía :** Callies, O., Sánchez-Canete, M.P., Gamarro, F., Jiménez, I.A., Castanys, S., Bazzocchi, I.L. *J Nat Prod* (2015) 78, 736-45

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	$\delta$ (ppm)
1	1	CH	74.3
2	2	CH	72.8
3	3	CH2	40.5
4	4	C	69.2
5	5	C	91.8
6	6	CH2	25.9
7	7	CH	47.6
8	8	CH	70.5
9	9	CH	75.3
10	10	C	48.5
11	11	C	82.0
12	12	CH3	29.5
13	13	CH3	22.6
14	14	CH3	12.7
15	15	CH3	24.9
2a	2001	C	170.8
2b	2002	CH3	21.4
8a	8001	C	169.8
8b	8002	CH3	21.1
9a	9001	C	165.7
9b	9002	C	130.2
9c	9003	CH	129.5
9d	9004	CH	128.4
9e	9005	CH	133.0
9f	9006	CH	128.4
9g	9007	CH	129.5

### Estructura

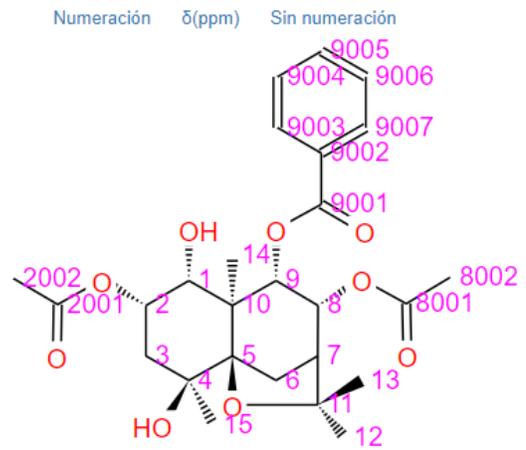


Figura N° 87. Captura NAPROC-13: compuesto 9, clave np78\_736\_9.

- Estructuras artículo clave: ej16\_95:

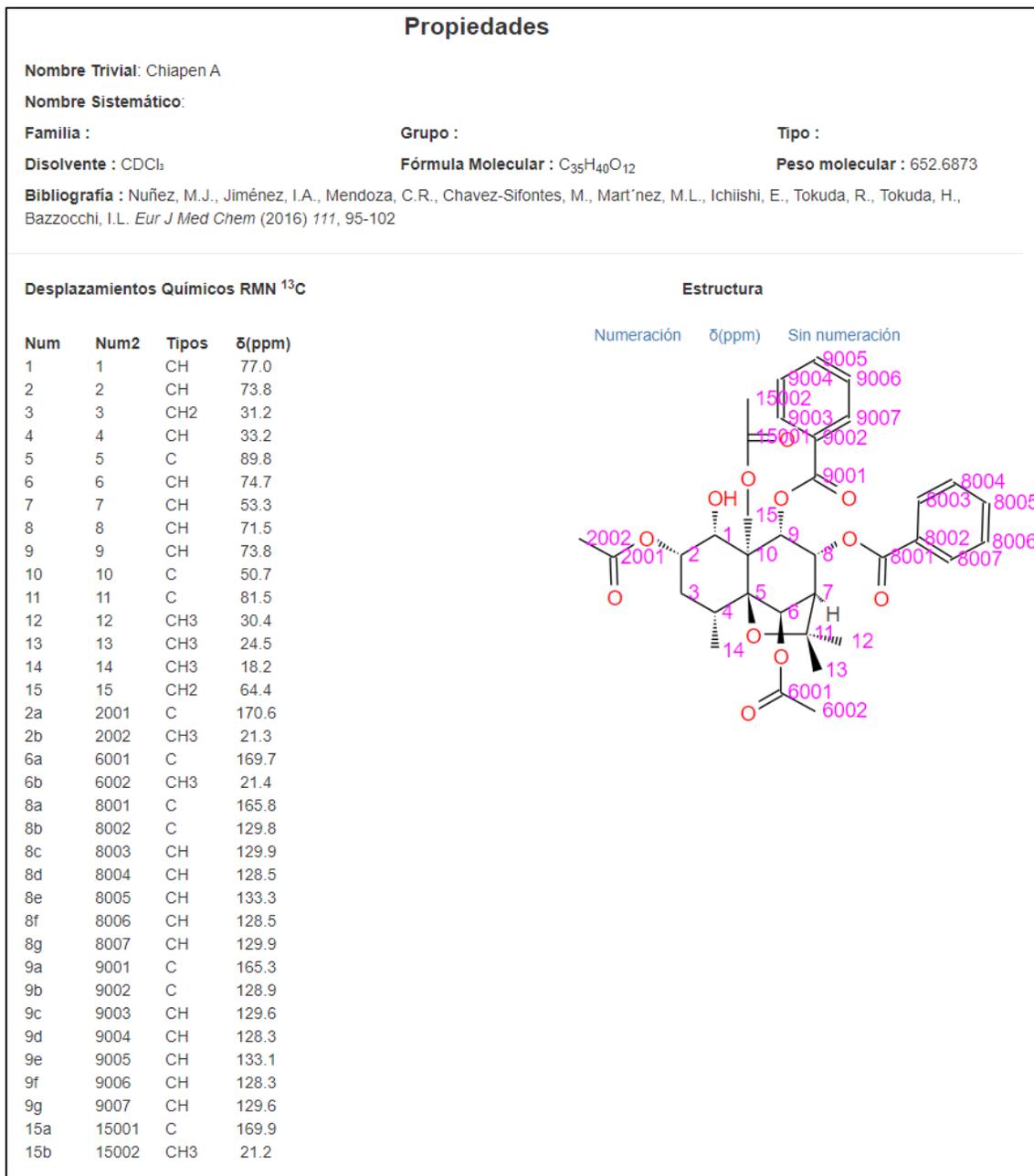


Figura N° 88. Captura NAPROC-13: compuesto 1, clave ej16\_95\_1.

## Propiedades

**Nombre Trivial:** Chiapen B

**Nombre Sistemático:**

**Familia :**

**Grupo :**

**Tipo :**

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>37</sub>H<sub>42</sub>O<sub>13</sub>

**Peso molecular :** 694.7241

**Bibliografía :** Nuñez, M.J., Jiménez, I.A., Mendoza, C.R., Chavez-Sifontes, M., Martínez, M.L., Ichiishi, E., Tokuda, R., Tokuda, H., Bazzocchi, I.L. *Eur J Med Chem* (2016) 111, 95-102

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	77.1
2	2	CH	68.9
3	3	CH <sub>2</sub>	31.3
4	4	CH	32.9
5	5	C	90.3
6	6	CH	74.9
7	7	CH	53.6
8	8	CH	71.1
9	9	CH	72.3
10	10	C	51.5
11	11	C	80.8
12	12	CH <sub>3</sub>	29.9
13	13	CH <sub>3</sub>	24.2
14	14	CH <sub>3</sub>	16.4
15	15	CH <sub>2</sub>	61.0
1a	1001	C	168.9
1b	1002	CH <sub>3</sub>	20.0
2a	2001	C	169.2
2b	2002	CH <sub>3</sub>	20.6
6a	6001	C	168.9
6b	6002	CH <sub>3</sub>	20.4
8a	8001	C	166.1
8b	8002	C	130.9
8c	8003	CH	130.3
8d	8004	CH	127.9
8e	8005	CH	132.9
8f	8006	CH	127.8
8g	8007	CH	129.7
9a	9001	C	164.9
9b	9002	C	130.1
9c	9003	CH	128.5
9d	9004	CH	127.7
9e	9005	CH	132.9
9f	9006	CH	127.6
9g	9007	CH	128.3
15a	15001	C	170.1
15b	15002	CH <sub>3</sub>	21.1

### Estructura



Figura N° 89. Captura NAPROC-13: compuesto 2, clave ej16\_95\_2.

- Estructuras artículo clave: np68\_1018:

Propiedades			
<b>Nombre Trivial:</b> 6b-Hydroxybetulin			
<b>Nombre Sistemático:</b>			
<b>Familia :</b> Terpenoids	<b>Grupo :</b> Triterpenoids	<b>Tipo :</b> Lupanes	
<b>Disolvente :</b> CDCl <sub>3</sub>	<b>Fórmula Molecular :</b> C <sub>30</sub> H <sub>50</sub> O <sub>3</sub>	<b>Peso molecular :</b> 458.351	
<b>Bibliografía :</b> Nuñez, M.J., Reyes, C.P., Jimenez, I.A., Moujir, L., Bazzocchi, I.L. <i>J Nat Prod</i> (2005) 68, 1018-21			
Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup> C			
Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH2	40.7
2	2	CH2	27.5
3	3	CH	79.1
4	4	C	39.6
5	5	CH	55.6
6	6	CH	68.9
7	7	CH2	42.0
8	8	C	40.0
9	9	CH	51.0
10	10	C	36.7
11	11	CH2	21.0
12	12	CH2	25.3
13	13	CH	36.4
14	14	C	42.9
15	15	CH2	27.1
16	16	CH2	33.6
17	17	C	47.7
18	18	CH	48.8
19	19	CH	47.7
20	20	C	150.4
21	21	CH2	29.7
22	22	CH2	29.1
23	23	CH3	27.6
24	24	CH3	16.9
25	25	CH3	17.7
26	26	CH3	16.9
27	27	CH3	15.1
28	28	CH2	60.4
29	29	CH2	109.7
30	30	CH3	19.1

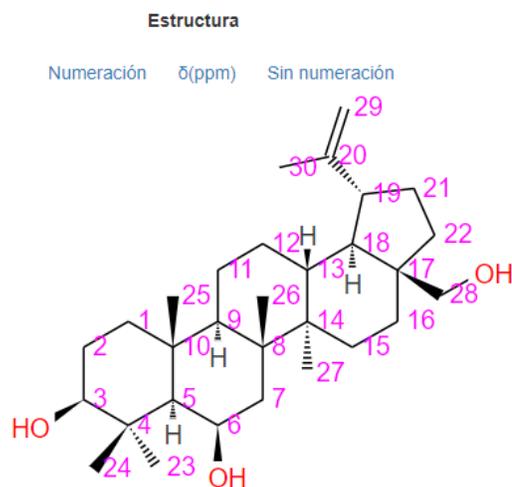


Figura N° 90. Captura NAPROC-13: compuesto 2, clave np68\_1018\_2.

## Propiedades

**Nombre Trivial:** 24-Hydroxybetulone

**Nombre Sistemático:**

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** Lupanes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>30</sub>H<sub>48</sub>O<sub>3</sub>

**Peso molecular :** 456.351

**Bibliografía :** Nuñez, M.J., Reyes, C.P., Jimenez, I.A., Moujir, L., Bazzocchi, I.L. *J Nat Prod* (2005) 68, 1018-21

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH2	39.3
2	2	CH2	34.3
3	3	C	221.4
4	4	C	50.7
5	5	CH	55.3
6	6	CH2	19.2
7	7	CH2	33.6
8	8	C	40.7
9	9	CH	49.5
10	10	C	36.6
11	11	CH2	21.7
12	12	CH2	25.2
13	13	CH	37.5
14	14	C	42.8
15	15	CH2	27.0
16	16	CH2	34.0
17	17	C	47.8
18	18	CH	48.6
19	19	CH	47.8
20	20	C	150.3
21	21	CH2	29.7
22	22	CH2	29.1
23	23	CH3	22.1
24	24	CH2	65.3
25	25	CH3	17.0
26	26	CH3	15.6
27	27	CH3	14.7
28	28	CH2	60.5
29	29	CH2	109.8
30	30	CH3	19.1

### Estructura

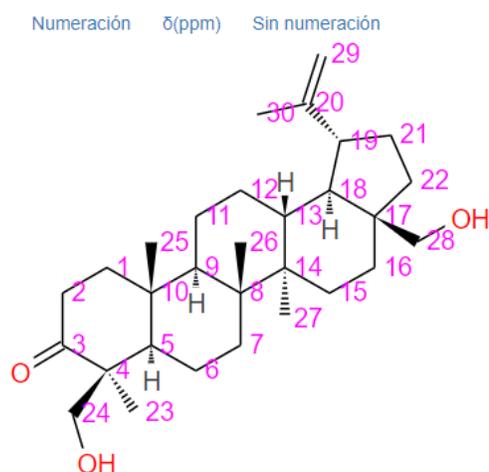


Figura N° 91. Captura NAPROC-13: compuesto 3, clave np68\_1018\_3.

## Propiedades

**Nombre Trivial:** 3b,6b-Dihydroxylup-20(29)-ene

**Nombre Sistemático:**

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** Lupanes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>30</sub>H<sub>50</sub>O<sub>2</sub>

**Peso molecular :** 442.352

**Bibliografía :** Nuñez, M.J., Reyes, C.P., Jimenez, I.A., Moujir, L., Bazzocchi, I.L. *J Nat Prod* (2005) 68, 1018-21

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH2	40.7
2	2	CH2	29.7
3	3	CH	79.1
4	4	C	39.6
5	5	CH	55.6
6	6	CH	69.0
7	7	CH2	42.1
8	8	C	39.9
9	9	CH	51.9
10	10	C	36.7
11	11	CH2	21.1
12	12	CH2	25.3
13	13	CH	37.2
14	14	C	43.0
15	15	CH2	27.5
16	16	CH2	35.5
17	17	C	43.1
18	18	CH	48.4
19	19	CH	48.0
20	20	C	150.9
21	21	CH2	29.9
22	22	CH2	40.0
23	23	CH3	27.6
24	24	CH3	16.8
25	25	CH3	17.7
26	26	CH3	16.9
27	27	CH3	14.9
28	28	CH3	18.0
29	29	CH2	109.4
30	30	CH3	19.3

### Estructura

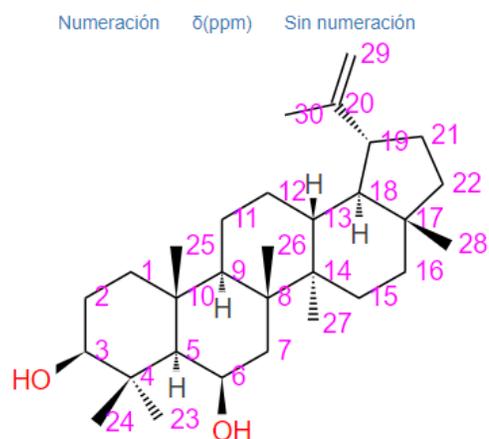


Figura N° 92. Captura NAPROC-13: compuesto 6, clave np68\_1018\_6.



## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:**

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>23</sub>H<sub>32</sub>O<sub>12</sub>

**Peso molecular :** 500.239

**Bibliografía :** Nuñez M.J., Cortes-Selva F., Bazzocchi I.L., Jimenez I.A., Gonzalez A.G., Ravelo A.G., Gavin J.A. *J Nat Prod* (2003) 66, 572-4

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	74.4
2	2	CH	67.8
3	3	CH2	41.1
4	4	C	72.2
5	5	C	92.5
6	6	CH	76.3
7	7	CH	66.4
8	8	C	199.1
9	9	CH	78.8
10	10	C	52.1
11	11	C	84.9
12	12	CH3	29.8
13	13	CH3	25.2
14	14	CH3	24.7
15	15	CH2	60.2
1a	1001	C	169.4
1b	1002	CH3	20.5
2a	2001	C	169.3
2b	2002	CH3	21.1
9a	9001	C	169.2
9b	9002	CH3	20.1
15a	15001	C	169.7
15b	15002	CH3	20.6

### Estructura

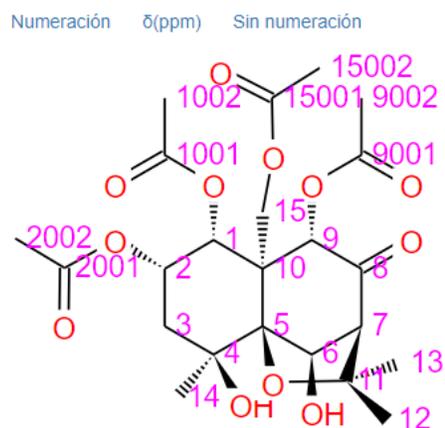


Figura N° 94. Captura NAPROC-13: compuesto 2, clave np03\_572\_2.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:**

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>21</sub>H<sub>30</sub>O<sub>11</sub>

**Peso molecular :** 458.218

**Bibliografía :** Nuñez M.J., Cortes-Selva F., Bazzocchi I.L., Jimenez I.A., Gonzalez A.G., Ravelo A.G., Gavin J.A. *J Nat Prod* (2003) 66, 572-4

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	72.4
2	2	CH	67.6
3	3	CH2	42.7
4	4	C	72.4
5	5	C	92.9
6	6	CH	76.3
7	7	CH	66.4
8	8	C	199.1
9	9	CH	79.3
10	10	C	52.1
11	11	C	84.7
12	12	CH3	29.7
13	13	CH3	25.1
14	14	CH3	24.8
15	15	CH2	60.5
1a	1001	C	169.3
1b	1002	CH3	20.5
9a	9001	C	169.2
9b	9002	CH3	20.8
15a	15001	C	169.9
15b	15002	CH3	20.1

### Estructura

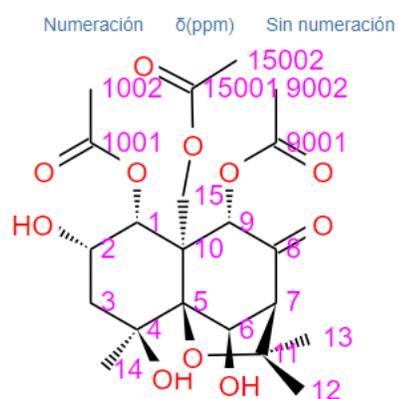


Figura N° 95. Captura NAPROC-13: compuesto 3, clave np03\_572\_3.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:**

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>29</sub>H<sub>38</sub>O<sub>17</sub>

**Peso molecular :** 658.6041

**Bibliografía :** Nuñez M.J., Cortes-Selva F., Bazzocchi I.L., Jimenez I.A., Gonzalez A.G., Ravelo A.G., Gavin J.A. *J Nat Prod* (2003) 66, 572-4

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	71.6
2	2	CH	68.8
3	3	CH	75.1
4	4	C	69.4
5	5	C	94.4
6	6	CH	73.7
7	7	CH	62.2
8	8	C	196.3
9	9	CH	78.4
10	10	C	52.2
11	11	C	86.1
12	12	CH <sub>3</sub>	18.7
13	13	CH <sub>2</sub>	69.6
14	14	CH <sub>3</sub>	24.0
15	15	CH <sub>2</sub>	60.3
1a	1001	C	168.7
1b	1002	CH <sub>3</sub>	20.5
2a	2001	C	168.0
2b	2002	CH <sub>3</sub>	20.9
3a	3001	C	168.9
3b	3002	CH <sub>3</sub>	20.8
6a	6001	C	168.8
6b	6002	CH <sub>3</sub>	21.2
9a	9001	C	168.7
9b	9002	CH <sub>3</sub>	20.8
13a	13001	C	170.3
13b	13002	CH <sub>3</sub>	20.2
15a	15001	C	169.1
15b	15002	CH <sub>3</sub>	20.4

### Estructura

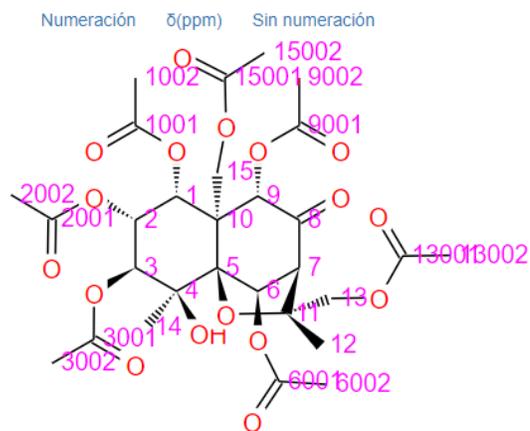


Figura N° 96. Captura NAPROC-13: compuesto 4, clave np03\_572\_4.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:**

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>31</sub>H<sub>42</sub>O<sub>18</sub>

**Peso molecular :** 702.6569

**Bibliografía :** Nuñez M.J., Cortes-Selva F., Bazzocchi I.L., Jimenez I.A., Gonzalez A.G., Ravelo A.G., Gavin J.A. *J Nat Prod* (2003) 66, 572-4

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	73.1
2	2	CH	69.0
3	3	CH	75.8
4	4	C	69.3
5	5	C	92.9
6	6	CH	73.9
7	7	CH	50.7
8	8	CH	69.0
9	9	CH	71.0
10	10	C	51.9
11	11	C	84.0
12	12	CH3	18.3
13	13	CH2	69.4
14	14	CH3	23.3
15	15	CH2	60.3
1a	1001	C	169.3
1b	1002	CH3	20.5
2a	2001	C	168.7
2b	2002	CH3	20.8
3a	3001	C	169.5
3b	3002	CH3	20.8
6a	6001	C	169.8
6b	6002	CH3	21.0
8a	8001	C	170.0
8b	8002	CH3	21.0
9a	9001	C	168.9
9b	9002	CH3	20.5
13a	13001	C	170.7
13b	13002	CH3	21.4
15a	15001	C	170.1
15b	15002	CH3	21.2

### Estructura

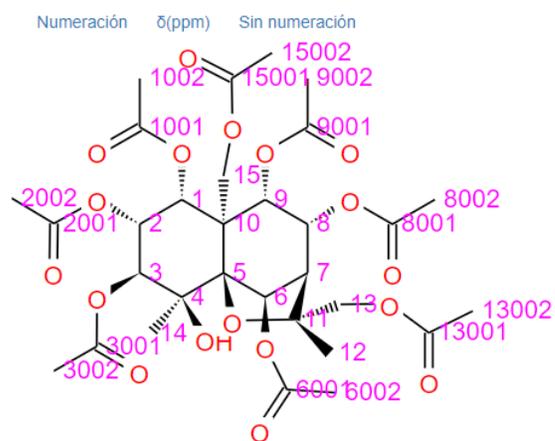


Figura N° 97. Captura NAPROC-13: compuesto 5, clave np03\_572\_5.

- Estructuras artículo clave: np04\_14:

<b>Nombre Trivial:</b> Chiapenine ES-I			
<b>Nombre Sistemático:</b>			
<b>Familia :</b> Terpenoids	<b>Grupo :</b> Sesquiterpenoids	<b>Tipo :</b> Agarofurans	
<b>Disolvente :</b> CDCl <sub>3</sub>	<b>Fórmula Molecular :</b> C <sub>48</sub> H <sub>51</sub> NO <sub>19</sub>	<b>Peso molecular :</b> 945.9169	
<b>Bibliografía :</b> Nuñez, M.J., Guadano, A., Jiménez, I.A., Ravelo, A.G., González-Coloma, A., Bazzocchi, I.L. <i>J Nat Prod</i> (2004) 67, 14-8			

Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup> C				Estructura		
Num	Num2	Tipos	δ(ppm)	Numeración	δ(ppm)	Sin numeración
1	1	CH	73.1			
2	2	CH	69.8			
3	3	CH	77.2			
4	4	C	69.9			
5	5	C	95.2			
6	6	CH	73.7			
7	7	CH	51.0			
8	8	CH	68.9			
9	9	CH	71.4			
10	10	C	52.2			
11	11	C	85.0			
12	12	CH2	69.9			
13	13	CH3	17.2			
14	14	CH3	22.7			
15	15	CH2	60.8			
2'	102	C	164.9			
3'	103	C	125.1			
4'	104	CH	137.9			
5'	105	CH	120.6			
6'	106	CH	152.1			
7'	107	CH2	31.4			
8'	108	CH2	38.4			
9'	109	C	77.7			
10'	110	CH3	28.2			
11'	111	C	172.4			
12'	112	C	168.0			
1a	1001	C	164.7			
1b	1002	C	128.3			
1c	1003	CH	128.8			
1d	1004	CH	129.7			
1e	1005	CH	133.4			
1f	1006	CH	129.7			
1g	1007	CH	128.8			
2a	2001	C	165.2			
2b	2002	C	128.6			
2c	2003	CH	129.1			
2d	2004	CH	129.9			
2e	2005	CH	134.0			
2f	2006	CH	129.9			
2g	2007	CH	129.1			
6a	6001	C	169.8			
6b	6002	CH3	21.1			
8a	8001	C	170.0			
8b	8002	CH3	20.9			
9a	9001	C	168.9			
9b	9002	CH3	19.9			
14a	14001	C	170.3			
14b	14002	CH3	21.6			

Figura N° 98. Captura NAPROC-13: compuesto 1, clave np04\_14\_1.

## Propiedades

Nombre Trivial: Chiapenine ES-II

Nombre Sistemático:

Familia : Terpenoids

Grupo : Sesquiterpenoids

Tipo : Agarofurans

Disolvente : CDCl<sub>3</sub>

Fórmula Molecular : C<sub>48</sub>H<sub>47</sub>NO<sub>13</sub>

Peso molecular : 901.8641

Bibliografía : Nuñez, M.J., Guadano, A., Jiménez, I.A., Ravelo, A.G., González-Coloma, A., Bazzocchi, I.L. *J Nat Prod* (2004) 67, 14-8

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	71.4
2	2	CH	70.0
3	3	CH	75.9
4	4	C	69.9
5	5	C	95.4
6	6	CH	73.5
7	7	CH	62.3
8	8	C	195.6
9	9	CH	78.8
10	10	C	52.6
11	11	C	86.7
12	12	CH2	69.9
13	13	CH3	18.7
14	14	CH3	23.5
15	15	CH2	60.8
2'	102	C	164.9
3'	103	C	125.1
4'	104	CH	137.9
5'	105	CH	120.7
6'	106	CH	152.3
7'	107	CH2	31.5
8'	108	CH2	38.8
9'	109	C	77.8
10'	110	CH3	27.8
11'	111	C	172.2
12'	112	C	167.9
1a	1001	C	164.7
1b	1002	C	128.3
1c	1003	CH	128.8
1d	1004	CH	129.7
1e	1005	CH	133.8
1f	1006	CH	129.7
1g	1007	CH	128.8
2a	2001	C	164.8
2b	2002	C	129.0
2c	2003	CH	129.0
2d	2004	CH	129.7
2e	2005	CH	134.1
2f	2006	CH	129.7
2g	2007	CH	129.0
6a	6001	C	169.2
6b	6002	CH3	21.4
9a	9001	C	169.4
9b	9002	CH3	19.6
14a	14001	C	169.8
14b	14002	CH3	20.5

### Estructura

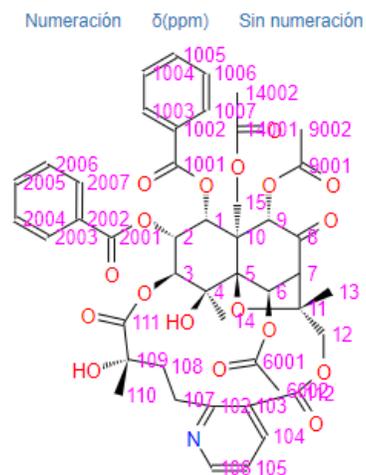


Figura N° 99. Captura NAPROC-13: compuesto 2, clave np04\_14\_2.

## Propiedades

Nombre Trivial: Chiapenine ES-III

Nombre Sistemático:

Familia : Terpenoids

Grupo : Sesquiterpenoids

Tipo : Agarofurans

Disolvente : CDCl<sub>3</sub>

Fórmula Molecular : C<sub>39</sub>H<sub>43</sub>NO<sub>17</sub>

Peso molecular : 797.7578

Bibliografía : Nuñez, M.J., Guadano, A., Jiménez, I.A., Ravelo, A.G., González-Coloma, A., Bazzocchi, I.L. *J Nat Prod* (2004) 67, 14-8

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	73.7
2	2	CH	70.1
3	3	CH	78.2
4	4	C	70.1
5	5	C	95.9
6	6	CH	74.2
7	7	CH	62.3
8	8	C	195.8
9	9	CH	79.2
10	10	C	53.0
11	11	C	86.4
12	12	CH <sub>2</sub>	70.1
13	13	CH <sub>3</sub>	18.8
14	14	CH <sub>3</sub>	23.3
15	15	CH <sub>2</sub>	60.7
2'	102	C	164.8
3'	103	C	128.7
4'	104	CH	138.5
5'	105	CH	125.0
6'	106	CH	152.2
7'	107	CH <sub>2</sub>	31.5
8'	108	CH <sub>2</sub>	38.8
9'	109	C	77.6
10'	110	CH <sub>3</sub>	27.5
11'	111	C	172.5
12'	112	C	167.2
1a	1001	C	165.0
1b	1002	C	128.7
1c	1003	CH	129.9
1d	1004	CH	128.7
1e	1005	CH	133.9
1f	1006	CH	128.7
1g	1007	CH	129.9
6a	6001	C	169.2
6b	6002	CH <sub>3</sub>	20.5
9a	9001	C	169.2
9b	9002	CH <sub>3</sub>	19.6
14a	14001	C	169.3
14b	14002	CH <sub>3</sub>	21.4

### Estructura

Numeración    δ(ppm)    Sin numeración

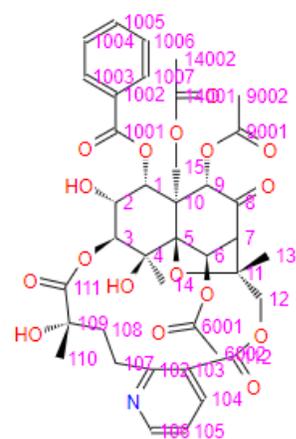


Figura N° 100. Captura NAPROC-13: compuesto 3, clave np04\_14\_3.

## Propiedades

**Nombre Trivial:** Chiapenine ES-IV

**Nombre Sistemático:**

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>34</sub>H<sub>41</sub>NO<sub>17</sub>

**Peso molecular :** 735.6883

**Bibliografía :** Nuñez, M.J., Guadano, A., Jiménez, I.A., Ravelo, A.G., González-Coloma, A., Bazzocchi, I.L. *J Nat Prod* (2004) 67, 14-8

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	73.7
2	2	CH	69.7
3	3	CH	78.2
4	4	C	70.0
5	5	C	96.0
6	6	CH	73.5
7	7	CH	62.3
8	8	C	195.9
9	9	CH	78.6
10	10	C	52.7
11	11	C	86.2
12	12	CH2	70.0
13	13	CH3	18.7
14	14	CH3	23.3
15	15	CH2	60.7
2'	102	C	164.3
3'	103	C	125.2
4'	104	CH	137.8
5'	105	CH	121.1
6'	106	CH	152.4
7'	107	CH2	29.7
8'	108	CH2	38.7
9'	109	C	77.2
10'	110	CH3	27.7
11'	111	C	172.6
12'	112	C	167.3
1a	1001	C	169.7
1b	1002	CH3	20.5
6a	6001	C	169.2
6b	6002	CH3	21.4
9a	9001	C	169.4
9b	9002	CH3	20.2
14a	14001	C	169.6
14b	14002	CH3	20.7

### Estructura

Numeración    δ(ppm)    Sin numeración

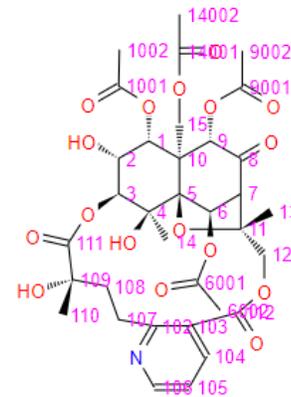


Figura N° 101. Captura NAPROC-13: compuesto 4, clave np04\_14\_4.

- Estructuras artículo clave: ph112\_244:

Propiedades			
<b>Nombre Trivial:</b> Leonatriol			
<b>Nombre Sistemático:</b>			
<b>Familia :</b> Terpenoids	<b>Grupo :</b> Triterpenoids	<b>Tipo :</b> D:B-Friedobaccharanes	
<b>Disolvente :</b> CDCl <sub>3</sub>	<b>Fórmula Molecular :</b> C <sub>30</sub> H <sub>52</sub> O <sub>3</sub>	<b>Peso molecular :</b> 460.7352	
<b>Bibliografía :</b> Núñez, M.J., Ardiles, A.E., Martínez, M.L., Torres-Romero, D., Jiménez, I.A., Bazzocchi, I.L. <i>Phytochemi Lett</i> (2012) 5, 244-8			
Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup> C			
Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH2	17.8
2	2	CH2	27.5
3	3	CH	76.1
4	4	C	40.6
5	5	C	141.8
6	6	CH	121.7
7	7	CH2	23.4
8	8	CH	44.4
9	9	C	35.3
10	10	CH	49.7
11	11	CH2	34.2
12	12	CH2	32.5
13	13	C	36.3
14	14	C	37.7
15	15	CH2	29.0
16	16	CH2	33.9
17	17	C	31.5
18	18	CH2	44.5
19	19	CH2	40.1
20	20	CH2	33.9
21	21	CH	79.6
22	22	C	73.0
23	23	CH3	28.8
24	24	CH3	25.5
25	25	CH3	17.4
26	26	CH3	15.5
27	27	CH3	20.0
28	28	CH3	32.6
29	29	CH3	23.1
30	30	CH3	26.4

Estructura		
Numeración	δ(ppm)	Sin numeración

Figura N° 102. Captura NAPROC-13: compuesto 1, clave ph112\_244\_1.

## Propiedades

**Nombre Trivial:** Leonatriolone

**Nombre Sistemático:**

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** D:B-Friedobaccharanes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>30</sub>H<sub>50</sub>O<sub>3</sub>

**Peso molecular :** 458.7192

**Bibliografía :** Núñez, M.J., Ardiles, A.E., Martínez, M.L., Torres-Romero, D., Jiménez, I.A., Bazzocchi, I.L. *Phytochemi Lett* (2012) 5, 244-8

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH2	18.1
2	2	CH2	27.7
3	3	CH	76.3
4	4	C	40.8
5	5	C	142.0
6	6	CH	121.9
7	7	CH2	23.7
8	8	CH	44.6
9	9	C	35.5
10	10	CH	50.0
11	11	CH2	34.2
12	12	CH2	32.7
13	13	C	36.6
14	14	C	37.9
15	15	CH2	29.1
16	16	CH2	34.1
17	17	C	31.5
18	18	CH2	44.8
19	19	CH2	36.5
20	20	CH2	31.0
21	21	C	215.2
22	22	C	76.3
23	23	CH3	29.0
24	24	CH3	25.5
25	25	CH3	17.6
26	26	CH3	15.2
27	27	CH3	20.3
28	28	CH3	32.6
29	29	CH3	26.5
30	30	CH3	26.6

### Estructura



Figura N° 103. Captura NAPROC-13: compuesto 2, clave ph12\_244\_2.

## Propiedades

**Nombre Trivial:** Cassinolide

**Nombre Sistemático:**

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** Friedelanes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>31</sub>H<sub>46</sub>O<sub>5</sub>

**Peso molecular :** 498.6967

**Bibliografía :** Núñez, M.J., Ardiles, A.E., Martínez, M.L., Torres-Romero, D., Jiménez, I.A., Bazzocchi, I.L. *Phytochemi Lett* (2012) 5, 244-8

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	98.9
2	2	CH	143.2
3	3	C	178.1
4	4	CH	40.1
5	5	C	43.3
6	6	CH <sub>2</sub>	28.2
7	7	CH <sub>2</sub>	17.3
8	8	CH	47.7
9	9	C	38.8
10	10	CH	47.8
11	11	CH <sub>2</sub>	33.9
12	12	CH <sub>2</sub>	28.7
13	13	C	38.9
14	14	C	37.6
15	15	CH <sub>2</sub>	28.8
16	16	CH <sub>2</sub>	35.9
17	17	C	30.1
18	18	CH	44.2
19	19	CH <sub>2</sub>	30.2
20	20	C	40.3
21	21	CH <sub>2</sub>	29.9
22	22	CH <sub>2</sub>	36.2
23	23	CH <sub>3</sub>	7.9
24	24	CH	99.4
25	25	CH <sub>3</sub>	17.5
26	26	CH <sub>3</sub>	15.9
27	27	CH <sub>3</sub>	17.2
28	28	CH <sub>3</sub>	31.6
29	29	C	179.0
30	30	CH <sub>3</sub>	31.8
29a	29001	CH <sub>3</sub>	51.3

### Estructura

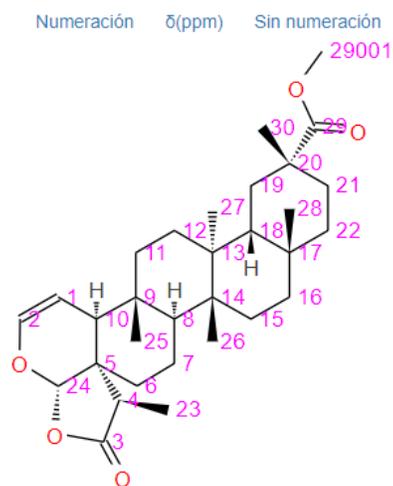


Figura N° 104. Captura NAPROC-13: compuesto 3, clave ph12\_244\_3.

- Estructuras artículo clave: th11\_3030:

Nombre Trivial: Uragogin					
Nombre Sistemático:					
Familia : Terpenoids		Grupo : Triterpenoids		Tipo : Oleananes	
Disolvente : CDCl <sub>3</sub>		Fórmula Molecular : C <sub>51</sub> H <sub>88</sub> O <sub>8</sub>		Peso molecular : 809.0849	
Bibliografía : Núñez, M.J., Kennedy, M.L., Jiménez, I.A., Bazzocchi, I.L. <i>Tetrahedron</i> (2011) 67, 3030-3					
Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup> C			Estructura		
Num	Num2	Tipos	δ(ppm)	Numeración	δ(ppm)
1	1	CH2	38.3		
2	2	CH2	22.7		
3	3	CH	80.9		
4	4	C	37.9		
5	5	CH	55.3		
6	6	CH2	18.3		
7	7	CH2	32.5		
8	8	C	39.8		
9	9	CH	47.5		
10	10	C	36.9		
11	11	CH2	23.5		
12	12	CH	121.6		
13	13	C	145.2		
14	14	C	41.7		
15	15	CH2	26.1		
16	16	CH2	26.9		
17	17	C	32.6		
18	18	CH	47.2		
19	19	CH2	46.8		
20	20	C	31.1		
21	21	CH2	34.7		
22	22	CH2	37.1		
23	23	CH3	28.1		
24	24	CH3	16.8		
25	25	CH3	15.5		
26	26	CH3	16.8		
27	27	CH3	25.9		
28	28	CH3	28.4		
29	29	CH3	33.3		
30	30	CH3	23.7		
1'	101	C	128.5		
2'	102	CH	116.6		
3'	103	C	143.8		
4'	104	C	144.8		
5'	105	CH	117.5		
6'	106	CH	122.2		
7'	107	CH	143.7		
8'	108	CH	117.3		
9'	109	C	167.0		
1''	201	C	127.3		
2''	202	CH	109.3		
3''	203	C	147.0		
4''	204	C	146.6		
5''	205	CH	114.8		
6''	206	CH	120.8		
7''	207	CH	76.4		
8''	208	CH	76.0		
9''	209	CH2	62.9		
3''a	203001	CH3	56.0		
9''a	209001	C	170.4		
9''b	209002	CH3	20.7		

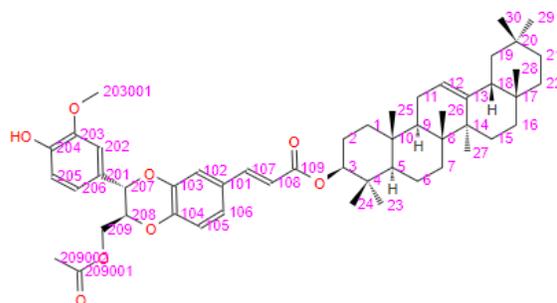


Figura N° 105. Captura NAPROC-13: compuesto 1, clave th11\_3030\_1.

- Estructuras artículo clave: ej12\_295:

Propiedades						
<b>Nombre Trivial:</b>						
<b>Nombre Sistemático:</b> 3β,29-dihydroxy-olean-18-ene						
<b>Familia :</b> Terpenoids	<b>Grupo :</b> Triterpenoids	<b>Tipo :</b> Oleananes				
<b>Disolvente :</b> CDCl <sub>3</sub>	<b>Fórmula Molecular :</b> C <sub>30</sub> H <sub>50</sub> O <sub>2</sub>	<b>Peso molecular :</b> 442.7198				
<b>Bibliografía :</b> Osorio, A.A., Muñóz, A., Torres-Romero, D., Bedoya, L.M., Perestelo, N.R., Jiménez, I.A., Alcamí, J., Bazzocchi, I.L. <i>Euro J Med Chem</i> (2012) 52, 295-303						
Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup> C						
Num	Num2	Tipos	δ(ppm)	Estructura		
				Numeración	δ(ppm)	Sin numeración
1	1	CH2	38.9			
2	2	CH2	27.4			
3	3	CH	78.9			
4	4	C	38.9			
5	5	CH	55.4			
6	6	CH2	18.2			
7	7	CH2	34.6			
8	8	C	40.7			
9	9	CH	51.1			
10	10	C	37.2			
11	11	CH2	21.0			
12	12	CH2	26.1			
13	13	CH	38.8			
14	14	C	43.2			
15	15	CH2	27.4			
16	16	CH2	36.9			
17	17	C	34.5			
18	18	C	147.8			
19	19	CH	124.4			
20	20	C	27.1			
21	21	CH2	28.0			
22	22	CH2	37.5			
23	23	CH3	27.9			
24	24	CH3	15.4			
25	25	CH3	16.7			
26	26	CH3	16.1			
27	27	CH3	14.7			
28	28	CH3	25.5			
29	29	CH2	70.6			
30	30	CH3	25.7			

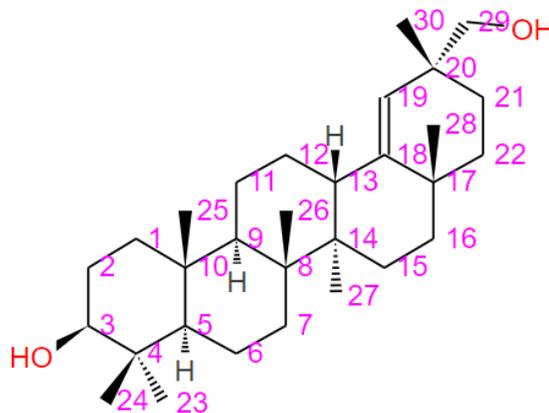


Figura N° 106. Captura NAPROC-13: compuesto 1, clave ej12\_295\_1.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** 9-hydroxy-3-oxo-olean-18-ene

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** Oleananes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>30</sub>H<sub>48</sub>O<sub>2</sub>

**Peso molecular :** 440.7038

**Bibliografía :** Osorio, A.A., Muñóz, A., Torres-Romero, D., Bedoya, L.M., Perestelo, N.R., Jiménez, I.A., Alcamí, J., Bazzocchi, I.L. *Euro J Med Chem* (2012) 52, 295-303

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH2	39.8
2	2	CH2	34.0
3	3	C	218.3
4	4	C	47.2
5	5	CH	54.8
6	6	CH2	19.6
7	7	CH2	33.7
8	8	C	40.6
9	9	CH	50.4
10	10	C	36.8
11	11	CH2	21.5
12	12	CH2	26.0
13	13	CH	38.9
14	14	C	43.2
15	15	CH2	27.3
16	16	CH2	36.8
17	17	C	34.5
18	18	C	147.5
19	19	CH	124.7
20	20	C	28.0
21	21	CH2	27.9
22	22	CH2	37.3
23	23	CH3	26.8
24	24	CH3	20.9
25	25	CH3	16.5
26	26	CH3	15.9
27	27	CH3	14.5
28	28	CH3	25.5
29	29	CH2	70.5
30	30	CH3	25.6

### Estructura

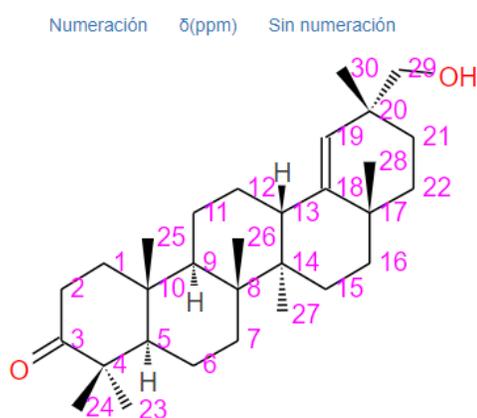


Figura N° 107. Captura NAPROC-13: compuesto 2, clave ej12\_295\_2.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** 6 $\beta$ ,29-dihydroxy-3-oxoolean-18-ene

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** Oleananes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>30</sub>H<sub>48</sub>O<sub>3</sub>

**Peso molecular :** 456.7032

**Bibliografía :** Osorio, A.A., Muñóz, A., Torres-Romero, D., Bedoya, L.M., Perestelo, N.R., Jiménez, I.A., Alcamí, J., Bazzocchi, I.L. *Euro J Med Chem* (2012) 52, 295-303

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	$\delta$ (ppm)
1	1	CH2	42.2
2	2	CH2	34.4
3	3	C	216.7
4	4	C	49.0
5	5	CH	56.4
6	6	CH	69.7
7	7	CH2	42.2
8	8	C	39.9
9	9	CH	51.3
10	10	C	36.8
11	11	CH2	21.4
12	12	CH2	26.1
13	13	CH	38.1
14	14	C	43.5
15	15	CH2	27.5
16	16	CH2	36.9
17	17	C	34.5
18	18	C	147.6
19	19	CH	124.9
20	20	C	37.4
21	21	CH2	28.0
22	22	CH2	37.4
23	23	CH3	25.1
24	24	CH3	23.6
25	25	CH3	17.3
26	26	CH3	17.7
27	27	CH3	14.9
28	28	CH3	25.5
29	29	CH2	70.5
30	30	CH3	25.7

### Estructura

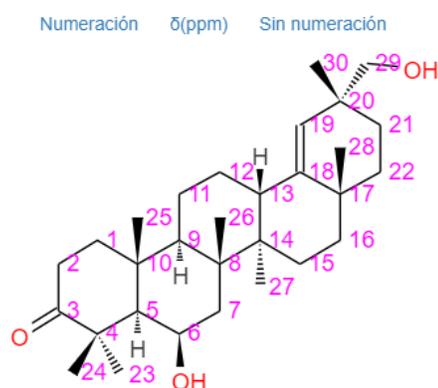


Figura N° 108. Captura NAPROC-13: compuesto 3, clave ej12\_295\_3.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** 6β-hydroxy-3-oxo-olean-18-ene

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** Oleananes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>30</sub>H<sub>48</sub>O<sub>2</sub>

**Peso molecular :** 440.7038

**Bibliografía :** Osorio, A.A., Muñóz, A., Torres-Romero, D., Bedoya, L.M., Perestelo, N.R., Jiménez, I.A., Alcamí, J., Bazzocchi, I.L. *Euro J Med Chem* (2012) 52, 295-303

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH2	42.0
2	2	CH2	34.1
3	3	C	216.5
4	4	C	48.7
5	5	CH	56.2
6	6	CH	69.4
7	7	CH2	42.0
8	8	C	39.6
9	9	CH	51.1
10	10	C	36.6
11	11	CH2	21.2
12	12	CH2	26.0
13	13	CH	37.4
14	14	C	43.3
15	15	CH2	27.4
16	16	CH2	37.3
17	17	C	34.2
18	18	C	142.4
19	19	CH	129.8
20	20	C	32.1
21	21	CH2	33.0
22	22	CH2	37.1
23	23	CH3	23.4
24	24	CH3	24.8
25	25	CH3	16.9
26	26	CH3	17.6
27	27	CH3	14.5
28	28	CH3	25.0
29	29	CH3	31.2
30	30	CH3	29.0

### Estructura

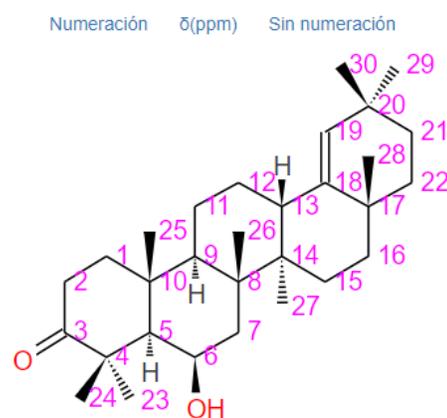


Figura N° 109. Captura NAPROC-13: compuesto 4, clave ej12\_295\_4.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** 3β,21α-dihidroxy-olean-18-ene

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** Oleananes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>30</sub>H<sub>50</sub>O<sub>2</sub>

**Peso molecular :** 442.7198

**Bibliografía :** Osorio, A.A., Muñóz, A., Torres-Romero, D., Bedoya, L.M., Perestelo, N.R., Jiménez, I.A., Alcamí, J., Bazzocchi, I.L. *Euro J Med Chem* (2012) 52, 295-303

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH2	38.6
2	2	CH2	27.1
3	3	CH	78.7
4	4	C	38.6
5	5	CH	55.2
6	6	CH2	18.0
7	7	CH2	34.5
8	8	C	40.7
9	9	CH	50.8
10	10	C	36.9
11	11	CH2	20.7
12	12	CH2	25.7
13	13	CH	37.5
14	14	C	43.5
15	15	CH2	27.1
16	16	CH2	36.4
17	17	C	37.0
18	18	C	143.1
19	19	CH	127.5
20	20	C	37.0
21	21	CH	73.1
22	22	CH2	43.7
23	23	CH3	27.7
24	24	CH3	15.8
25	25	CH3	16.4
26	26	CH3	15.8
27	27	CH3	13.9
28	28	CH3	26.7
29	29	CH3	28.5
30	30	CH3	21.4

### Estructura



Figura N° 110. Captura NAPROC-13: compuesto 5, clave ej12\_295\_5.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** 3 $\beta$ ,6 $\beta$ -dihydroxy-olean-18-ene

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** Oleananes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>30</sub>H<sub>50</sub>O<sub>2</sub>

**Peso molecular :** 442.7198

**Bibliografía :** Osorio, A.A., Muñóz, A., Torres-Romero, D., Bedoya, L.M., Perestelo, N.R., Jiménez, I.A., Alcamí, J., Bazzocchi, I.L. *Euro J Med Chem* (2012) 52, 295-303

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	$\delta$ (ppm)
1	1	CH2	40.8
2	2	CH2	27.5
3	3	CH	79.1
4	4	C	39.7
5	5	CH	55.6
6	6	CH	69.0
7	7	CH2	42.2
8	8	C	39.7
9	9	CH	51.8
10	10	C	36.8
11	11	CH2	21.2
12	12	CH2	26.2
13	13	CH	37.6
14	14	C	43.5
15	15	CH2	27.6
16	16	CH2	37.3
17	17	C	34.3
18	18	C	142.8
19	19	CH	129.9
20	20	C	32.3
21	21	CH2	33.3
22	22	CH2	40.8
23	23	CH3	27.6
24	24	CH3	16.8
25	25	CH3	18.1
26	26	CH3	17.5
27	27	CH3	14.8
28	28	CH3	25.2
29	29	CH3	31.3
30	30	CH3	29.1

### Estructura

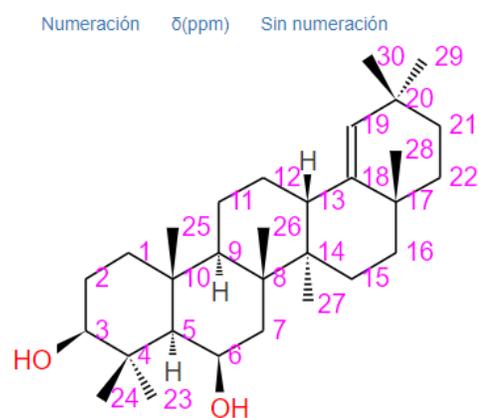


Figura N° 111. Captura NAPROC-13: compuesto 6, clave ej12\_295\_6.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** 21 $\alpha$ -hydroxy-3-oxo-olean-18-ene

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** Oleananes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>30</sub>H<sub>48</sub>O<sub>2</sub>

**Peso molecular :** 440.7038

**Bibliografía :** Osorio, A.A., Muñóz, A., Torres-Romero, D., Bedoya, L.M., Perestelo, N.R., Jiménez, I.A., Alcamí, J., Bazzocchi, I.L. *Euro J Med Chem* (2012) 52, 295-303

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

### Estructura

Num	Num2	Tipos	$\delta$ (ppm)
1	1	CH2	39.6
2	2	CH2	33.8
3	3	C	218.1
4	4	C	47.0
5	5	CH	54.6
6	6	CH2	19.4
7	7	CH2	33.7
8	8	C	40.6
9	9	CH	50.1
10	10	C	36.7
11	11	CH2	21.3
12	12	CH2	25.7
13	13	CH	37.6
14	14	C	43.6
15	15	CH2	27.3
16	16	CH2	36.3
17	17	C	36.9
18	18	C	142.9
19	19	CH	127.7
20	20	C	40.0
21	21	CH	73.1
22	22	CH2	43.5
23	23	CH3	26.6
24	24	CH3	20.7
25	25	CH3	16.3
26	26	CH3	15.7
27	27	CH3	13.9
28	28	CH3	26.7
29	29	CH3	28.5
30	30	CH3	21.4



Figura N° 112. Captura NAPROC-13: compuesto 7, clave ej12\_295\_7.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** 3,21-dioxo-olean-18-ene

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** Oleananes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>30</sub>H<sub>46</sub>O<sub>2</sub>

**Peso molecular :** 438.6878

**Bibliografía :** Osorio, A.A., Muñóz, A., Torres-Romero, D., Bedoya, L.M., Perestelo, N.R., Jiménez, I.A., Alcamí, J., Bazzocchi, I.L. *Euro J Med Chem* (2012) 52, 295-303

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH2	39.6
2	2	CH2	33.8
3	3	C	218.0
4	4	C	47.0
5	5	CH	54.6
6	6	CH2	19.4
7	7	CH2	33.4
8	8	C	40.3
9	9	CH	50.2
10	10	C	33.7
11	11	CH2	21.3
12	12	CH2	25.9
13	13	CH	38.7
14	14	C	42.5
15	15	CH2	27.2
16	16	CH2	33.9
17	17	C	40.6
18	18	C	143.4
19	19	CH	127.8
20	20	C	45.1
21	21	C	215.2
22	22	CH2	52.3
23	23	CH3	24.5
24	24	CH3	20.7
25	25	CH3	13.3
26	26	CH3	15.6
27	27	CH3	14.7
28	28	CH3	25.6
29	29	CH3	28.8
30	30	CH3	26.3

### Estructura

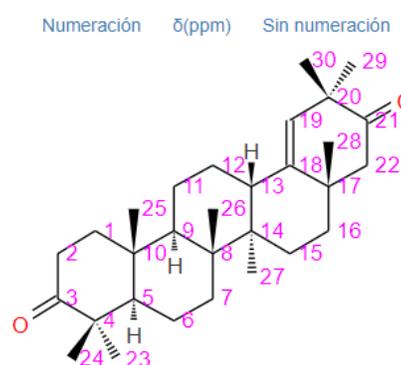


Figura N° 113. Captura NAPROC-13: compuesto 8, clave ej12\_295\_8.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** 29-Acetoxy-3-oxo-olean-18-ene

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** Oleananes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>32</sub>H<sub>50</sub>O<sub>3</sub>

**Peso molecular :** 482.7406

**Bibliografía :** Osorio, A.A., Muñoz, A., Torres-Romero, D., Bedoya, L.M., Perestelo, N.R., Jiménez, I.A., Alcami, J., Bazzocchi, I.L. *Euro J Med Chem* (2012) 52, 295-303

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH2	39.8
2	2	CH2	34.0
3	3	C	218.4
4	4	C	47.2
5	5	CH	54.7
6	6	CH2	19.6
7	7	CH2	33.7
8	8	C	41.5
9	9	CH	50.4
10	10	C	36.9
11	11	CH2	21.6
12	12	CH2	26.1
13	13	CH	38.9
14	14	C	43.4
15	15	CH2	27.3
16	16	CH2	36.6
17	17	C	34.5
18	18	C	147.2
19	19	CH	124.2
20	20	C	35.5
21	21	CH2	27.9
22	22	CH2	37.4
23	23	CH3	26.9
24	24	CH3	21.0
25	25	CH3	15.9
26	26	CH3	16.6
27	27	CH3	14.5
28	28	CH3	25.4
29	29	CH2	70.3
30	30	CH3	26.0
29a	29001	C	171.4
29b	29002	CH3	20.9

### Estructura



Figura N° 114. Captura NAPROC-13: compuesto 13, clave ej12\_295\_13.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** 3 $\beta$ ,21 $\alpha$ -Diacetoxy-olean-18-ene

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** Oleananes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>34</sub>H<sub>54</sub>O<sub>4</sub>

**Peso molecular :** 526.7934

**Bibliografía :** Osorio, A.A., Muñóz, A., Torres-Romero, D., Bedoya, L.M., Perestelo, N.R., Jiménez, I.A., Alcamí, J., Bazzocchi, I.L. *Euro J Med Chem* (2012) 52, 295-303

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	$\delta$ (ppm)
1	1	CH2	38.3
2	2	CH2	23.4
3	3	CH	80.7
4	4	C	37.6
5	5	CH	55.2
6	6	CH2	17.9
7	7	CH2	34.4
8	8	C	40.7
9	9	CH	50.7
10	10	C	36.9
11	11	CH2	20.7
12	12	CH2	25.7
13	13	CH	37.6
14	14	C	43.5
15	15	CH2	27.2
16	16	CH2	36.5
17	17	C	36.4
18	18	C	143.1
19	19	CH	126.9
20	20	C	35.7
21	21	CH	75.5
22	22	CH2	40.0
23	23	CH3	27.7
24	24	CH3	16.3
25	25	CH3	16.4
26	26	CH3	15.8
27	27	CH3	14.1
28	28	CH3	26.3
29	29	CH3	28.6
30	30	CH3	23.0
3a	3001	C	170.8
3b	3002	CH3	21.1
21a	21001	C	170.7
21b	21002	CH3	21.2

### Estructura

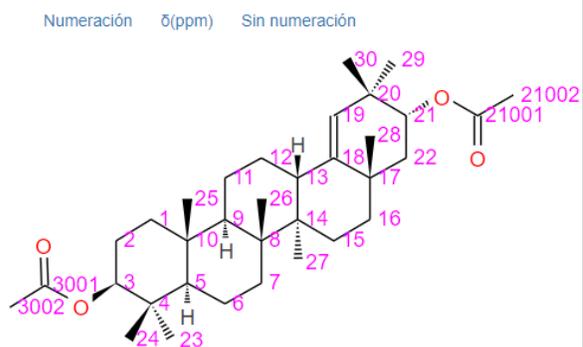


Figura N° 115. Captura NAPROC-13: compuesto 14, clave ej12\_295\_14.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** 3 $\beta$ -Acetoxy-6 $\beta$ -hydroxy-olean-18-ene

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** Oleananes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>32</sub>H<sub>52</sub>O<sub>3</sub>

**Peso molecular :** 484.7566

**Bibliografía :** Osorio, A.A., Muñoz, A., Torres-Romero, D., Bedoya, L.M., Perestelo, N.R., Jiménez, I.A., Alcamí, J., Bazzocchi, I.L. *Euro J Med Chem* (2012) 52, 295-303

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	$\delta$ (ppm)
1	1	CH2	37.1
2	2	CH2	23.6
3	3	CH	80.7
4	4	C	38.4
5	5	CH	55.3
6	6	CH	68.7
7	7	CH2	42.0
8	8	C	39.5
9	9	CH	51.5
10	10	C	36.5
11	11	CH2	21.0
12	12	CH2	26.0
13	13	CH	37.4
14	14	C	43.2
15	15	CH2	27.4
16	16	CH2	37.4
17	17	C	34.1
18	18	C	142.5
19	19	CH	129.7
20	20	C	32.1
21	21	CH2	33.1
22	22	CH2	40.3
23	23	CH3	27.3
24	24	CH3	17.9
25	25	CH3	17.3
26	26	CH3	17.8
27	27	CH3	14.5
28	28	CH3	25.0
29	29	CH3	31.1
30	30	CH3	28.9
3a	3001	C	170.8
3b	3002	CH3	21.1

### Estructura

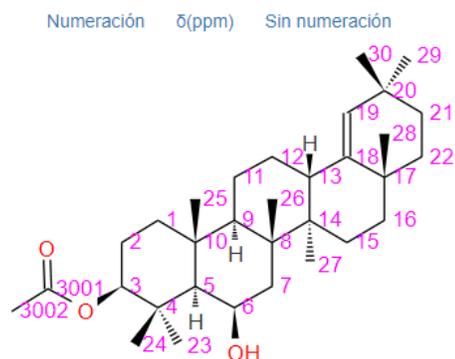


Figura N° 116. Captura NAPROC-13: compuesto 15, clave ej12\_295\_15.



## Propiedades

**Nombre Trivial:** Montecrinane C

**Nombre Sistemático:**

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** Montecrinanes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>30</sub>H<sub>50</sub>O<sub>3</sub>

**Peso molecular :** 458.7192

**Bibliografía :** Purino, M., Ardiles, A.E., Callies, O., Jiménez, I.A., Bazzocchi, I.L. *Chem Eur J* (2016) 22, 7582-91

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH2	37.2
2	2	CH2	27.7
3	3	CH	79.2
4	4	C	38.9
5	5	CH	50.6
6	6	CH2	23.9
7	7	CH	118.0
8	8	C	145.6
9	9	CH	48.8
10	10	C	34.9
11	11	CH2	18.1
12	12	CH2	33.7
13	13	C	43.5
14	14	C	51.2
15	15	CH2	33.9
16	16	CH2	28.4
17	17	CH	35.5
18	18	CH	53.2
19	19	CH2	28.9
20	20	CH2	32.9
21	21	C	214.8
22	22	C	76.2
23	23	CH3	27.6
24	24	CH3	14.7
25	25	CH3	13.1
26	26	CH3	27.3
27	27	CH3	21.9
28	28	CH3	18.5
29	29	CH3	26.6
30	30	CH3	26.6

### Estructura

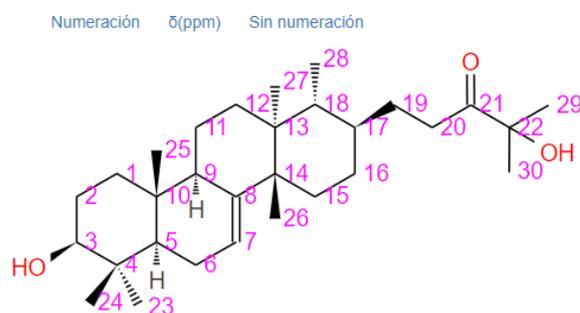


Figura N° 118. Captura NAPROC-13: compuesto 3, clave ejc16\_7582\_3.

- Estructuras artículo clave: bmc06\_1573:

Propiedades			
<b>Nombre Trivial:</b> 3-epinepeticin			
<b>Nombre Sistemático:</b>			
<b>Familia :</b> Terpenoids	<b>Grupo :</b> Triterpenoids	<b>Tipo :</b> Lupanes	
<b>Disolvente :</b> CDCl <sub>3</sub>	<b>Fórmula Molecular :</b> C <sub>30</sub> H <sub>50</sub> O <sub>2</sub>	<b>Peso molecular :</b> 442.7198	
<b>Bibliografía :</b> Reyes, C.P., Nunez, M.J., Jimenez, I.A., Busserolles, J., Alcaraz, M.J., Bazzocchi, I.L. <i>Bioorg Med Chem</i> (2006) 14, 1573-9			
Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup> C			
Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH2	35.4
2	2	CH2	25.6
3	3	CH	75.9
4	4	C	37.8
5	5	CH	48.9
6	6	CH2	18.3
7	7	CH2	35.1
8	8	C	42.7
9	9	CH	55.6
10	10	C	39.1
11	11	CH	70.6
12	12	CH2	37.6
13	13	CH	37.1
14	14	C	42.7
15	15	CH2	27.3
16	16	CH2	35.4
17	17	C	43.0
18	18	CH	47.7
19	19	CH	47.7
20	20	C	150.2
21	21	CH2	29.8
22	22	CH2	39.8
23	23	CH3	22.3
24	24	CH3	28.7
25	25	CH3	16.2
26	26	CH3	17.2
27	27	CH3	14.6
28	28	CH3	18.0
29	29	CH2	109.8
30	30	CH3	19.3

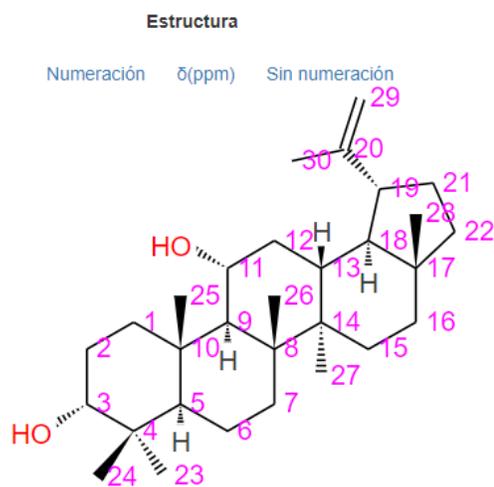


Figura N° 119. Captura NAPROC-13: compuesto 1, clave bmc06\_1573\_1.

## Propiedades

**Nombre Trivial:** 3-Epicalexanduladiol

**Nombre Sistemático:**

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** Lupanes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>30</sub>H<sub>50</sub>O<sub>2</sub>

**Peso molecular :** 442.7198

**Bibliografía :** Reyes, C.P., Nunez, M.J., Jimenez, I.A., Busserolles, J., Alcaraz, M.J., Bazzocchi, I.L. *Bioorg Med Chem* (2006) 14, 1573-9

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH2	33.3
2	2	CH2	25.2
3	3	CH	76.2
4	4	C	37.5
5	5	CH	49.0
6	6	CH2	18.2
7	7	CH2	34.1
8	8	C	41.1
9	9	CH	49.7
10	10	C	37.2
11	11	CH2	20.7
12	12	CH2	24.7
13	13	CH	37.2
14	14	C	44.2
15	15	CH2	36.8
16	16	CH	77.0
17	17	C	48.6
18	18	CH	47.7
19	19	CH	47.6
20	20	C	150.0
21	21	CH2	29.9
22	22	CH2	37.7
23	23	CH3	28.2
24	24	CH3	22.1
25	25	CH3	15.9
26	26	CH3	16.0
27	27	CH3	16.3
28	28	CH3	11.7
29	29	CH2	109.8
30	30	CH3	19.3

### Estructura

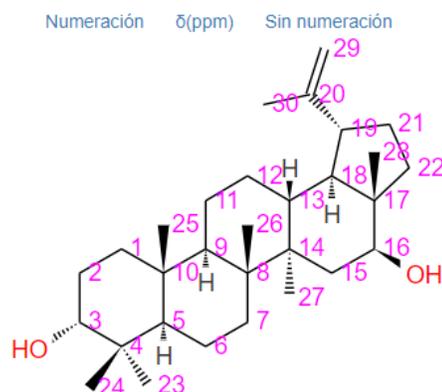


Figura N° 120. Captura NAPROC-13: compuesto 2, clave bmc06\_1573\_2.

## Propiedades

**Nombre Trivial:** 11 $\alpha$ -Hydroxyglochidone

**Nombre Sistemático:**

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** Lupanes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>30</sub>H<sub>46</sub>O<sub>2</sub>

**Peso molecular :** 438.6878

**Bibliografía :** Reyes, C.P., Nunez, M.J., Jimenez, I.A., Busserolles, J., Alcaraz, M.J., Bazzocchi, I.L. *Bioorg Med Chem* (2006) 14, 1573-9

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	$\delta$ (ppm)
1	1	CH	165.1
2	2	CH	123.6
3	3	C	205.3
4	4	C	45.0
5	5	CH	52.9
6	6	CH <sub>2</sub>	18.9
7	7	CH <sub>2</sub>	34.5
8	8	C	42.9
9	9	CH	48.9
10	10	C	40.6
11	11	CH	70.6
12	12	CH <sub>2</sub>	37.3
13	13	CH	37.1
14	14	C	42.8
15	15	CH <sub>2</sub>	27.3
16	16	CH <sub>2</sub>	35.3
17	17	C	43.0
18	18	CH	47.5
19	19	CH	47.7
20	20	C	150.2
21	21	CH <sub>2</sub>	29.7
22	22	CH <sub>2</sub>	39.8
23	23	CH <sub>3</sub>	21.4
24	24	CH <sub>3</sub>	28.2
25	25	CH <sub>3</sub>	19.9
26	26	CH <sub>3</sub>	17.4
27	27	CH <sub>3</sub>	14.4
28	28	CH <sub>3</sub>	18.0
29	29	CH <sub>2</sub>	113.5
30	30	CH <sub>3</sub>	19.3

### Estructura

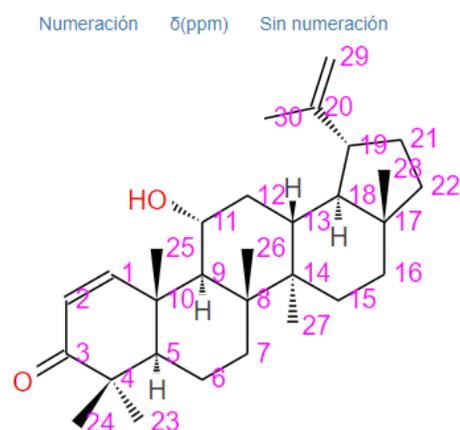


Figura N° 121. Captura NAPROC-13: compuesto 3, clave bmc06\_1573\_3.

## Propiedades

**Nombre Trivial:** 28-Hydroxy-3,20-dioxo-29-norlupane

**Nombre Sistemático:**

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Triterpenoids

**Tipo :** Lupanes

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>29</sub>H<sub>46</sub>O<sub>3</sub>

**Peso molecular :** 442.6765

**Bibliografía :** Reyes, C.P., Nunez, M.J., Jimenez, I.A., Busserolles, J., Alcaraz, M.J., Bazzocchi, I.L. *Bioorg Med Chem* (2006) 14, 1573-9

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH2	39.3
2	2	CH2	33.5
3	3	C	214.9
4	4	C	46.9
5	5	CH	54.6
6	6	CH2	19.6
7	7	CH2	33.8
8	8	C	40.7
9	9	CH	49.5
10	10	C	36.6
11	11	CH2	21.2
12	12	CH2	27.6
13	13	CH	36.3
14	14	C	42.5
15	15	CH2	27.3
16	16	CH2	34.1
17	17	C	47.8
18	18	CH	49.0
19	19	CH	51.7
20	20	C	209.4
21	21	CH2	27.1
22	22	CH2	29.0
23	23	CH3	26.6
24	24	CH3	21.0
25	25	CH3	14.5
26	26	CH3	15.6
27	27	CH3	15.7
28	28	CH2	60.1
30	30	CH3	28.8

### Estructura

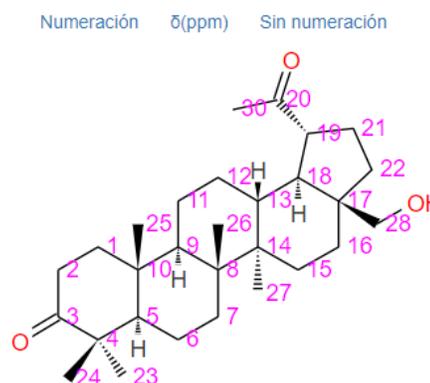


Figura N° 122. Captura NAPROC-13: compuesto 4, clave bmc06\_1573\_4.

- Estructuras artículo clave: jmc07\_4808:

Propiedades			
<b>Nombre Trivial:</b>			
<b>Nombre Sistemático:</b> 1 $\alpha$ ,6 $\beta$ ,15-Triacetoxi-2 $\alpha$ -9 $\beta$ -dibenzoyloxy-dihidro- $\beta$ -agarofuran			
<b>Familia :</b> Terpenoids	<b>Grupo :</b> Sesquiterpenoids	<b>Tipo :</b> Agarofurans	
<b>Disolvente :</b> CDCl <sub>3</sub>	<b>Fórmula Molecular :</b> C <sub>35</sub> H <sub>40</sub> O <sub>11</sub>	<b>Peso molecular :</b> 636.6879	
<b>Bibliografía :</b> Reyes, C.P., Muñoz-Martínez, F., Torrecillas, I.R., Mendoza, C.R., Gamarro, F., Bazzocchi, I.L., Nuñez, M.J., Pardo, L., Castanys, S., Campillo, M., Jiménez, I.A. <i>J Med Chem</i> (2007) 50, 4808-17			
Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup> C			
Num	Num2	Tipos	$\delta$ (ppm)
1	1	CH	75.1
2	2	CH	70.2
3	3	CH <sub>2</sub>	30.9
4	4	CH	33.0
5	5	C	89.2
6	6	CH	78.1
7	7	CH	48.8
8	8	CH <sub>2</sub>	34.9
9	9	CH	69.4
10	10	C	53.2
11	11	C	82.8
12	12	CH <sub>3</sub>	30.3
13	13	CH <sub>3</sub>	26.0
14	14	CH <sub>2</sub>	66.0
15	15	CH <sub>3</sub>	18.1
1a	1001	C	169.3
1b	1002	CH <sub>3</sub>	21.3
2a	2001	C	166.0
2b	2002	C	129.7
2c	2003	CH	129.8
2d	2004	CH	128.6
2e	2005	CH	133.2
2f	2006	CH	128.6
2g	2007	CH	129.8
6a	6001	C	170.0
6b	6002	CH <sub>3</sub>	21.2
9a	9001	C	165.3
9b	9002	C	129.1
9c	9003	CH	128.7
9d	9004	CH	128.3
9e	9005	CH	130.1
9f	9006	CH	128.3
9g	9007	CH	128.7
14a	14001	C	170.7
14b	14002	CH <sub>3</sub>	20.4

**Estructura**

Figura N° 123. Captura NAPROC-13: compuesto 38, clave jmc07\_4808\_38.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** 1 $\alpha$ ,6 $\beta$ ,15-Triacetoxo-2 $\alpha$ ,8 $\alpha$ ,9 $\alpha$ -tribenzoyloxy-dihidro- $\beta$ -agarofuran

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>42</sub>H<sub>44</sub>O<sub>13</sub>

**Peso molecular :** 756.7936

**Bibliografía :** Reyes, C.P., Muñoz-Martínez, F., Torrecillas, I.R., Mendoza, C.R., Gamarro, F., Bazzocchi, I.L., Nuñez, M.J., Pardo, L., Castanys, S., Campillo, M., Jiménez, I.A. *J Med Chem* (2007) 50, 4808-17

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Típos	$\delta$ (ppm)
1	1	CH	77.8
2	2	CH	70.5
3	3	CH <sub>2</sub>	32.3
4	4	CH	33.6
5	5	C	91.2
6	6	CH	75.7
7	7	CH	54.5
8	8	CH	71.8
9	9	CH	73.1
10	10	C	52.3
11	11	C	81.7
12	12	CH <sub>3</sub>	30.7
13	13	CH <sub>3</sub>	25.1
14	14	CH <sub>2</sub>	62.5
15	15	CH <sub>3</sub>	17.4
1a	1001	C	169.8
1b	1002	CH <sub>3</sub>	21.3
2a	2001	C	166.6
2b	2002	C	130.3
2c	2003	CH	131.1
2d	2004	CH	129.5
2e	2005	CH	133.9
2f	2006	CH	129.5
2g	2007	CH	131.1
6a	6001	C	170.2
6b	6002	CH <sub>3</sub>	20.7
8a	8001	C	166.8
8b	8002	C	131.7
8c	8003	CH	130.9
8d	8004	CH	129.3
8e	8005	CH	133.8
8f	8006	CH	129.3
8g	8007	CH	130.9
9a	9001	C	165.7
9b	9002	C	130.2
9c	9003	CH	130.5
9d	9004	CH	129.2
9e	9005	CH	133.6
9f	9006	CH	129.2
9g	9007	CH	130.5
14a	14001	C	171.2
14b	14002	CH <sub>3</sub>	21.9

### Estructura

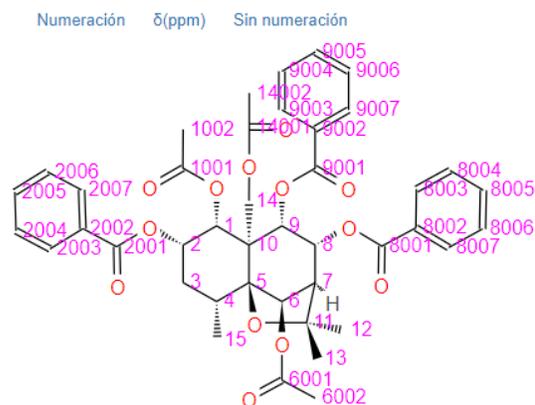


Figura N° 124. Captura NAPROC-13: compuesto 50, clave jmc07\_4808\_50.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** 6β-Acetoxy-1α,2α,8α,9α-tetrabenzoyloxy-15-hydroxy-dihydro-β-agarofuran

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>46</sub>H<sub>44</sub>O<sub>12</sub>

**Peso molecular :** 776.8263

**Bibliografía :** Reyes, C.P., Muñoz-Martínez, F., Torrecillas, I.R., Mendoza, C.R., Gamarro, F., Bazzocchi, I.L., Nuñez, M.J., Pardo, L., Castany, S., Campillo, M., Jiménez, I.A. *J Med Chem* (2007) 50, 4808-17

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	76.7
2	2	CH	70.3
3	3	CH <sub>2</sub>	31.4
4	4	CH	32.9
5	5	C	90.2
6	6	CH	75.1
7	7	CH	53.3
8	8	CH	70.5
9	9	CH	73.4
10	10	C	54.5
11	11	C	81.8
12	12	CH <sub>3</sub>	30.4
13	13	CH <sub>3</sub>	24.7
14	14	CH <sub>2</sub>	60.5
15	15	CH <sub>3</sub>	17.8
1a	1001	C	165.2
1b	1002	C	129.4
1c	1003	CH	129.5
1d	1004	CH	128.6
1e	1005	CH	133.1
1f	1006	CH	128.6
1g	1007	CH	129.5
2a	2001	C	165.1
2b	2002	C	129.0
2c	2003	CH	129.2
2d	2004	CH	128.0
2e	2005	CH	132.7
2f	2006	CH	128.0
2g	2007	CH	129.2
6a	6001	C	169.9
6b	6002	CH <sub>3</sub>	21.2
8a	8001	C	165.7
8b	8002	C	130.0
8c	8003	CH	129.6
8d	8004	CH	128.8
8e	8005	CH	133.5
8f	8006	CH	128.8
8g	8007	CH	129.6
9a	9001	C	164.2
9b	9002	C	128.7
9c	9003	CH	129.1
9d	9004	CH	127.6
9e	9005	CH	132.5
9f	9006	CH	127.6
9g	9007	CH	129.1

### Estructura



Figura N° 125. Captura NAPROC-13: compuesto 51, clave jmc07\_4808\_51.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** 6β,15-Diacetoxi-1α,2α,8α,9α-tetrabenzoiloxi-dihidro-β-agarofuran

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>47</sub>H<sub>46</sub>O<sub>13</sub>

**Peso molecular :** 818.8631

**Bibliografía :** Reyes, C.P., Muñoz-Martínez, F., Torrecillas, I.R., Mendoza, C.R., Gamarro, F., Bazzocchi, I.L., Nuñez, M.J., Pardo, L., Castanys, S., Campillo, M., Jiménez, I.A. *J Med Chem* (2007) 50, 4808-17

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	77.4
2	2	CH	70.0
3	3	CH <sub>2</sub>	31.5
4	4	CH	32.8
5	5	C	90.3
6	6	CH	74.8
7	7	CH	53.5
8	8	CH	71.1
9	9	CH	72.5
10	10	C	51.5
11	11	C	81.4
12	12	CH <sub>3</sub>	30.4
13	13	CH <sub>3</sub>	24.7
14	14	CH <sub>2</sub>	61.6
15	15	CH <sub>3</sub>	17.0
1a	1001	C	165.7
1b	1002	C	129.4
1c	1003	CH	129.8
1d	1004	CH	128.3
1e	1005	CH	133.2
1f	1006	CH	128.3
1g	1007	CH	129.8
2a	2001	C	165.2
2b	2002	C	129.1
2c	2003	CH	129.3
2d	2004	CH	127.9
2e	2005	CH	132.6
2f	2006	CH	127.9
2g	2007	CH	129.3
6a	6001	C	169.7
6b	6002	CH <sub>3</sub>	21.3
8a	8001	C	166.2
8b	8002	C	130.2
8c	8003	CH	129.9
8d	8004	CH	128.5
8e	8005	CH	133.3
8f	8006	CH	128.5
8g	8007	CH	129.9
9a	9001	C	164.6
9b	9002	C	128.9
9c	9003	CH	129.2
9d	9004	CH	127.6
9e	9005	CH	132.5
9f	9006	CH	127.6
9g	9007	CH	129.2
14a	14001	C	171.1
14b	14002	CH <sub>3</sub>	21.2

### Estructura

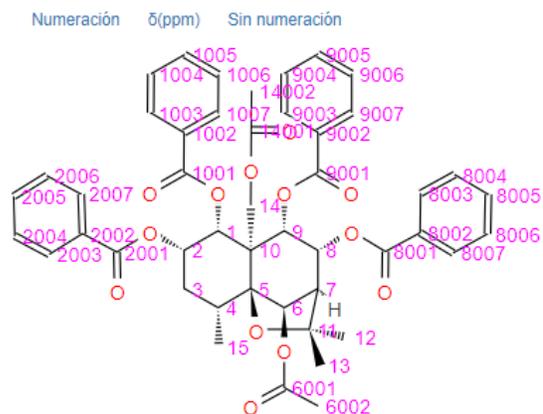


Figura N° 126. Captura NAPROC-13: compuesto 52, clave jmc07\_4808\_52.

- Estructuras artículo clave: bmc11\_2182:

Propiedades			
<b>Nombre Trivial:</b>			
<b>Nombre Sistemático:</b> (1S,4R,5S,6R,7R,8S,9R,10S)-1,8-Diacetoxy-9-benzoyloxy-6-nicotinoyloxy-dihydro-β-agarofuran			
<b>Familia :</b> Terpenoids		<b>Grupo :</b> Sesquiterpenoids	<b>Tipo :</b> Agarofurans
<b>Disolvente :</b> CDCl <sub>3</sub>		<b>Fórmula Molecular :</b> C <sub>32</sub> H <sub>37</sub> NO <sub>9</sub>	<b>Peso molecular :</b> 579.6397
<b>Bibliografía :</b> Torres-Romero, D., Jiménez, I.A., Rojas, R., Gilman, R.H., López, M., Bazzocchi, I.L. <i>Bioorg Med Chem</i> (2011) 19, 2182-9			
Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup> C			
Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	73.0
2	2	CH <sub>2</sub>	22.5
3	3	CH <sub>2</sub>	26.5
4	4	CH	34.1
5	5	C	89.6
6	6	CH	78.4
7	7	CH	53.6
8	8	CH	68.9
9	9	CH	72.3
10	10	C	48.8
11	11	C	82.7
12	12	CH <sub>3</sub>	31.3
13	13	CH <sub>3</sub>	26.3
14	14	CH <sub>3</sub>	17.2
15	15	CH <sub>3</sub>	18.5
1a	1001	C	169.7
1b	1002	CH <sub>3</sub>	20.5
6a	6001	C	163.9
6b	6002	C	125.4
6c	6003	CH	150.6
6d	6004	CH	153.8
6e	6005	CH	123.4
6f	6006	CH	136.9
8a	8001	C	169.0
8b	8002	CH <sub>3</sub>	20.5
9a	9001	C	165.4
9b	9002	C	129.1
9c	9003	CH	130.0
9d	9004	CH	128.1
9e	9005	CH	133.1
9f	9006	CH	128.1
9g	9007	CH	130.0

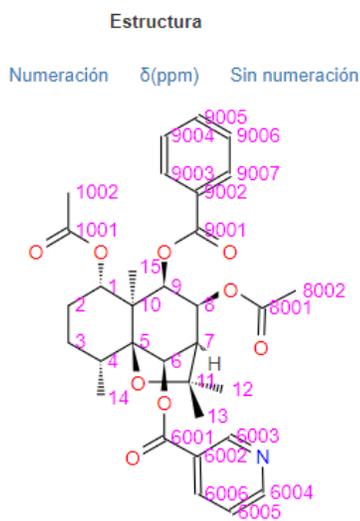


Figura N° 127. Captura NAPROC-13: compuesto 1, clave bmc11\_2182\_1.

## Propiedades

Nombre Trivial:

Nombre Sistemático: (1S,4R,5S,6R,7S,8S,9R,10S)-1,8-Diacetoxy-9-benzoyloxy-6-hydroxy-dihydro-β-agarofuran

Familia : Terpenoids

Grupo : Sesquiterpenoids

Tipo : Agarofurans

Disolvente : CDCl<sub>3</sub>

Fórmula Molecular : C<sub>28</sub>H<sub>34</sub>O<sub>8</sub>

Peso molecular : 474.5454

Bibliografía : Torres-Romero, D., Jiménez, I.A., Rojas, R., Gilman, R.H., López, M., Bazzocchi, I.L. *Bioorg Med Chem* (2011) 19, 2182-9

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	73.4
2	2	CH <sub>2</sub>	21.4
3	3	CH <sub>2</sub>	26.5
4	4	CH	34.4
5	5	C	90.7
6	6	CH	76.3
7	7	CH	55.3
8	8	CH	69.6
9	9	CH	72.6
10	10	C	48.4
11	11	C	82.6
12	12	CH <sub>3</sub>	31.3
13	13	CH <sub>3</sub>	26.5
14	14	CH <sub>3</sub>	17.7
15	15	CH <sub>3</sub>	18.6
1a	1001	C	169.6
1b	1002	CH <sub>3</sub>	20.6
8a	8001	C	169.7
8b	8002	CH <sub>3</sub>	20.5
9a	9001	C	165.6
9b	9002	C	129.2
9c	9003	CH	130.0
9d	9004	CH	128.0
9e	9005	CH	133.0
9f	9006	CH	128.0
9g	9007	CH	130.0

### Estructura

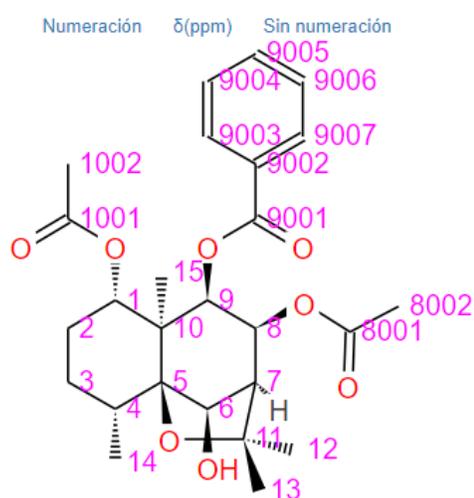


Figura N° 128. Captura NAPROC-13: compuesto 2, clave bmc11\_2182\_2.

## Propiedades

Nombre Trivial:

Nombre Sistemático: (1S,4S,5S,6R,7R,8S,9R,10S)-1,6-Diacetoxy-9-benzoyloxy-4,8-dihydroxy-dihydro-β-agarofuran

Familia : Terpenoids

Grupo : Sesquiterpenoids

Tipo : Agarofurans

Disolvente : CDCl<sub>3</sub>

Fórmula Molecular : C<sub>28</sub>H<sub>34</sub>O<sub>9</sub>

Peso molecular : 490.5448

Bibliografía : Torres-Romero, D., Jiménez, I.A., Rojas, R., Gilman, R.H., López, M., Bazzocchi, I.L. *Bioorg Med Chem* (2011) 19, 2182-9

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	75.1
2	2	CH <sub>2</sub>	22.9
3	3	CH <sub>2</sub>	38.3
4	4	C	72.4
5	5	C	90.9
6	6	CH	77.8
7	7	CH	54.8
8	8	CH	70.2
9	9	CH	75.0
10	10	C	49.4
11	11	C	84.5
12	12	CH <sub>3</sub>	30.4
13	13	CH <sub>3</sub>	26.2
14	14	CH <sub>3</sub>	23.7
15	15	CH <sub>3</sub>	19.7
1a	1001	C	170.0
1b	1002	CH <sub>3</sub>	21.3
6a	6001	C	170.4
6b	6002	CH <sub>3</sub>	21.3
9a	9001	C	169.5
9b	9002	C	130.0
9c	9003	CH	130.6
9d	9004	CH	128.1
9e	9005	CH	133.4
9f	9006	CH	128.1
9g	9007	CH	130.6

### Estructura

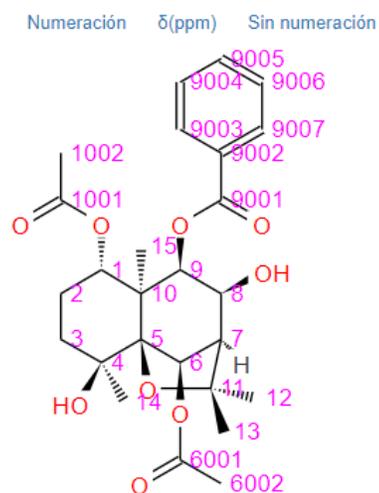


Figura N° 129. Captura NAPROC-13: compuesto 3, clave bmc11\_2182\_3.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** (1S,4S,5S,6R,7R,8S,9R,10S)-1,6-Diacetoxy-9-benzoyloxy-4,8-dihydroxy-dihydro-β-agarofuran

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>33</sub>H<sub>38</sub>O<sub>10</sub>

**Peso molecular :** 594.6511

**Bibliografía :** Torres-Romero, D., Jiménez, I.A., Rojas, R., Gilman, R.H., López, M., Bazzocchi, I.L. *Bioorg Med Chem* (2011) 19, 2182-9

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	72.4
2	2	CH2	22.4
3	3	CH2	38.5
4	4	C	70.4
5	5	C	91.8
6	6	CH	76.4
7	7	CH	52.8
8	8	CH	75.4
9	9	CH	76.2
10	10	C	50.7
11	11	C	83.4
12	12	CH3	29.8
13	13	CH3	25.2
14	14	CH3	23.7
15	15	CH3	19.2
1a	1001	C	169.6
1b	1002	CH3	21.0
6a	6001	C	165.6
6b	6002	C	129.8
6c	6003	CH	129.9
6d	6004	CH	128.4
6e	6005	CH	133.5
6f	6006	CH	128.4
6g	6007	CH	129.9
8a	8001	C	169.3
8b	8002	CH3	21.0
9a	9001	C	164.6
9b	9002	C	128.6
9c	9003	CH	129.9
9d	9004	CH	128.2
9e	9005	CH	133.0
9f	9006	CH	128.2
9g	9007	CH	129.9

### Estructura

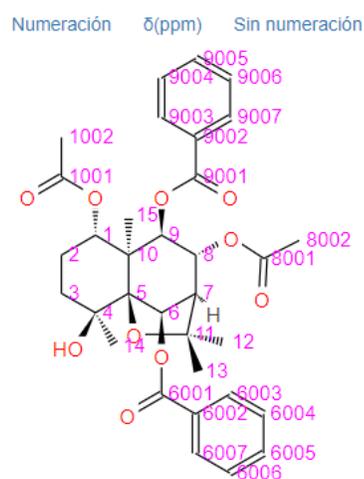


Figura N° 130. Captura NAPROC-13: compuesto 4, clave bmc11\_2182\_4.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** (1S,4S,5S,6R,7R,8S,9R,10S)-1,6-Diacetoxy-9-benzoyloxy-4,8-dihydroxy-dihydro-β-agarofuran

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>33</sub>H<sub>40</sub>O<sub>11</sub>

**Peso molecular :** 612.6665

**Bibliografía :** Torres-Romero, D., Jiménez, I.A., Rojas, R., Gilman, R.H., López, M., Bazzocchi, I.L. *Bioorg Med Chem* (2011) 19, 2182-9

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	71.8
2	2	CH2	22.8
3	3	CH2	36.8
4	4	C	72.8
5	5	C	90.7
6	6	CH	77.9
7	7	CH	54.5
8	8	CH	70.6
9	9	CH	72.1
10	10	C	48.6
11	11	C	84.4
12	12	CH3	30.2
13	13	CH3	26.5
14	14	CH3	23.5
15	15	CH3	19.5
1a	1001	C	169.6
1b	1002	CH3	20.4
8a	8001	C	171.2
8b	8002	CH	74.9
8c	8003	CH	73.9
8d	8004	C	139.3
8e	8005	CH	130.0
8f	8006	CH	128.2
8g	8007	CH	133.7
8h	8008	CH	128.2
8i	8009	CH	130.0
9a	9001	C	166.1
9b	9002	C	128.4
9c	9003	CH	128.3
9d	9004	CH	125.9
9e	9005	CH	127.8
9f	9006	CH	125.9
9g	9007	CH	128.3

### Estructura

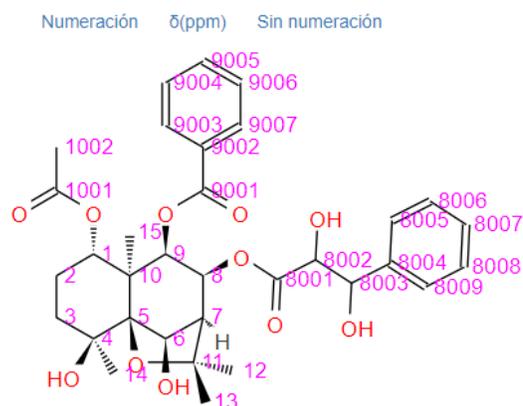


Figura N° 131. Captura NAPROC-13: compuesto 5, clave bmc11\_2182\_5.

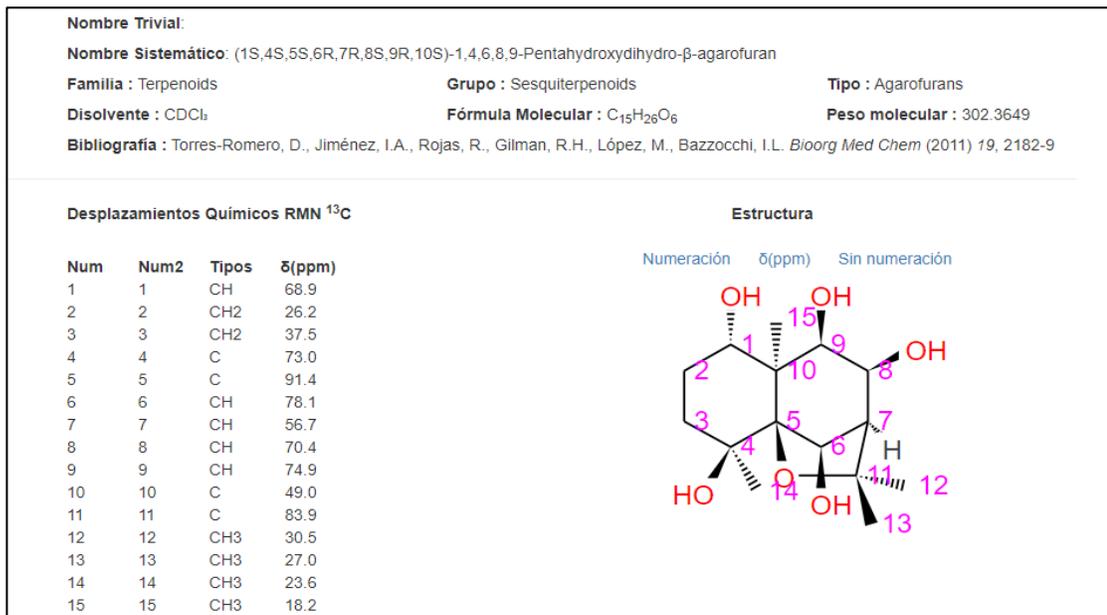


Figura N° 132. Captura NAPROC-13: compuesto 6, clave bmc11\_2182\_6.

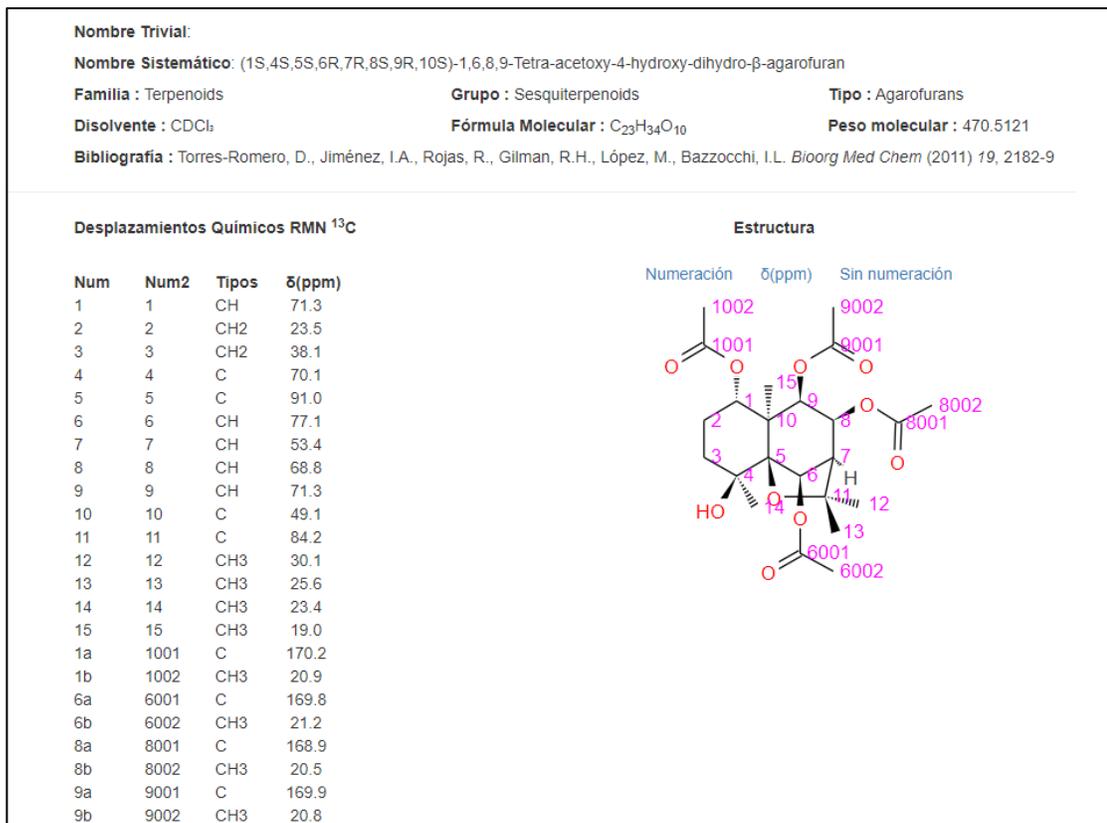


Figura N° 133. Captura NAPROC-13: compuesto 7, clave bmc11\_2182\_7.

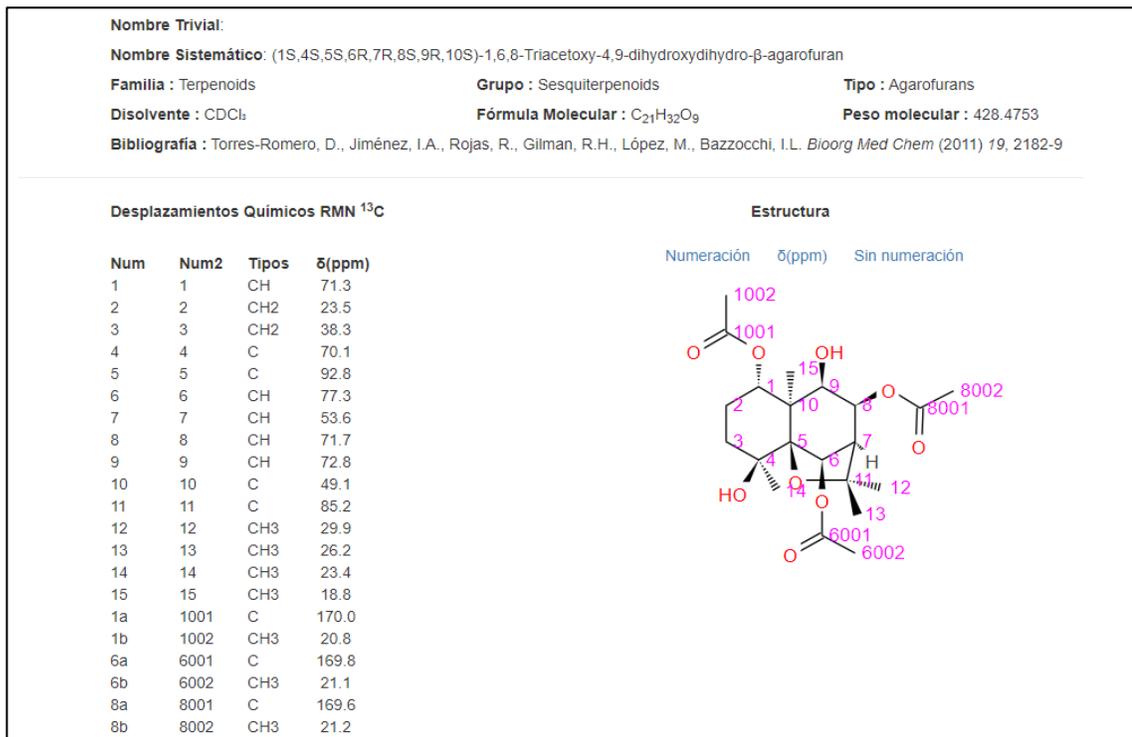


Figura N° 134. Captura NAPROC-13: compuesto 8, clave bmc11\_2182\_8.

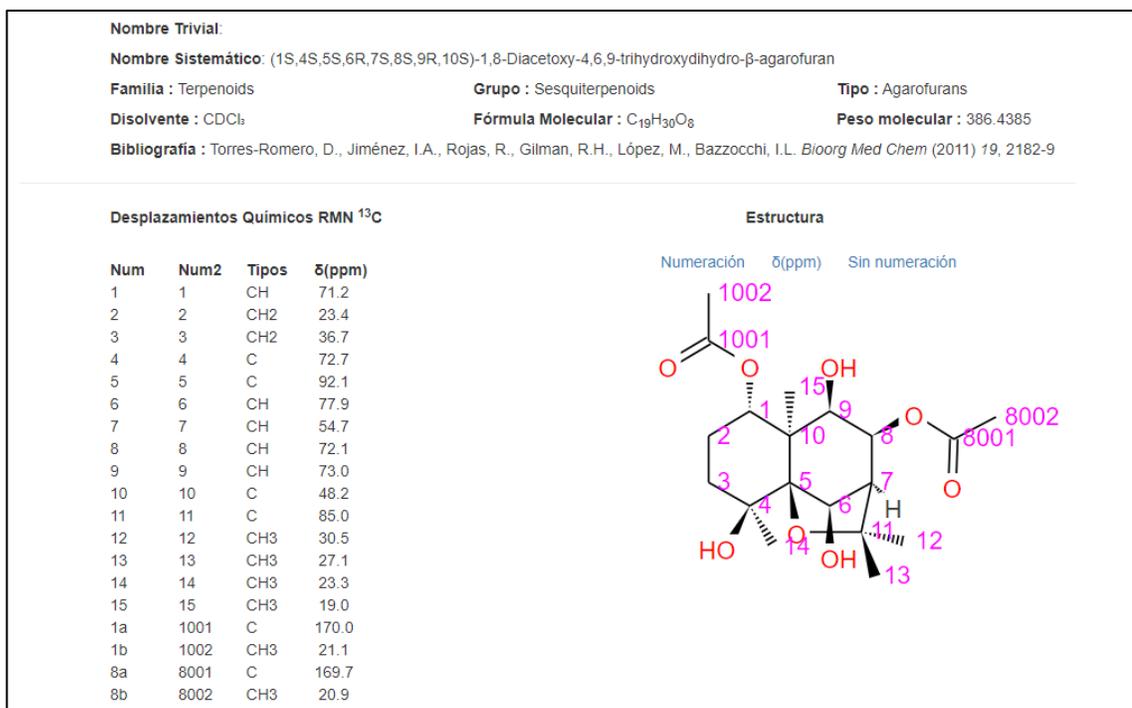


Figura N° 135. Captura NAPROC-13: compuesto 9, clave bmc11\_2182\_9.

- Estructuras artículo clave: np08\_1331:

Propiedades			
<b>Nombre Trivial:</b>			
<b>Nombre Sistemático:</b> (1S,4S,5S,6R,7S,8S,9R,10S)-1-Acetoxy-9-benzoyloxy-8-cinnamoyloxy-4,6-dihydroxydihydro-β-agarofuran			
<b>Familia :</b> Terpenoids	<b>Grupo :</b> Sesquiterpenoids	<b>Tipo :</b> Agarofurans	
<b>Disolvente :</b> CDCl <sub>3</sub>	<b>Fórmula Molecular :</b> C <sub>33</sub> H <sub>38</sub> O <sub>9</sub>	<b>Peso molecular :</b> 578.356	
<b>Bibliografía :</b> Torres-Romero, D., King-Díaz, B., Jiménez, I.A., Lotina-Hennsen, B., Bazzocchi, I.L. <i>J Nat Prod</i> (2008) 71, 1331-5			
Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup> C			
Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	72.1
2	2	CH <sub>2</sub>	22.9
3	3	CH <sub>2</sub>	36.9
4	4	C	72.8
5	5	C	90.9
6	6	CH	78.0
7	7	CH	54.7
8	8	CH	69.2
9	9	CH	71.9
10	10	C	48.7
11	11	C	84.5
12	12	CH <sub>3</sub>	27.0
13	13	CH <sub>3</sub>	30.4
14	14	CH <sub>3</sub>	23.5
15	15	CH <sub>3</sub>	19.6
1a	1001	C	169.7
1b	1002	CH <sub>3</sub>	20.5
8a	8001	C	164.8
8b	8002	CH	117.4
8g	8007	CH	145.3
8h	8008	C	133.8
8i	8009	CH	130.0
8j	8010	CH	128.5
8k	8011	CH	133.1
8l	8012	CH	128.5
8m	8013	CH	130.0
9a	9001	C	165.2
9b	9002	C	129.1
9c	9003	CH	128.2
9d	9004	CH	127.9
9e	9005	CH	130.2
9f	9006	CH	127.9
9g	9007	CH	128.2

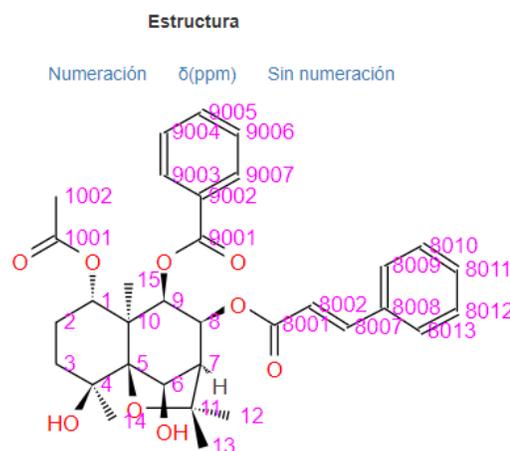


Figura N° 136. Captura NAPROC-13: compuesto 1, clave np08\_1331\_1.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** (1S,4S,5S,6R,7R,8S,9R,10S)-1,6-Diacetoxy-9-benzoyloxy-8-cinnamoyloxy-4-hydroxydihydro-β-agarofuran

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>35</sub>H<sub>40</sub>O<sub>10</sub>

**Peso molecular :** 620.376

**Bibliografía :** Torres-Romero, D., King-Díaz, B., Jiménez, I.A., Lotina-Hennsen, B., Bazzocchi, I.L. *J Nat Prod* (2008) 71, 1331-5

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	73.2
2	2	CH2	23.3
3	3	CH2	38.6
4	4	C	70.5
5	5	C	91.5
6	6	CH	77.2
7	7	CH	53.9
8	8	CH	69.2
9	9	CH	72.3
10	10	C	50.0
11	11	C	84.7
12	12	CH3	26.5
13	13	CH3	30.3
14	14	CH3	23.9
15	15	CH3	19.6
1a	1001	C	169.9
1b	1002	CH3	20.7
6a	6001	C	170.0
6b	6002	CH3	21.5
8a	8001	C	164.9
8b	8002	CH	117.2
8g	8007	CH	145.6
8h	8008	C	134.1
8i	8009	CH	128.1
8j	8010	CH	128.4
8k	8011	CH	129.5
8l	8012	CH	128.4
8m	8013	CH	128.1
9a	9001	C	165.5
9b	9002	C	130.4
9c	9003	CH	129.5
9d	9004	CH	128.7
9e	9005	CH	133.3
9f	9006	CH	128.7
9g	9007	CH	129.5

### Estructura



Figura N° 137. Captura NAPROC-13: compuesto 2, clave np08\_1331\_2.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** (1S,4R,5S,6R,7S,8S,9R,10S)-1-Acetoxy-9-benzoyloxy-8-cinnamoyloxy-6-hydroxydihydro-β-agarofuran

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>33</sub>H<sub>38</sub>O<sub>8</sub>

**Peso molecular :** 562.356

**Bibliografía :** Torres-Romero, D., King-Díaz, B., Jiménez, I.A., Lotina-Hennsen, B., Bazzocchi, I.L. *J Nat Prod* (2008) 71, 1331-5

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	73.3
2	2	CH <sub>2</sub>	21.7
3	3	CH <sub>2</sub>	26.6
4	4	CH	33.6
5	5	C	90.7
6	6	CH	75.7
7	7	CH	55.6
8	8	CH	69.8
9	9	CH	72.9
10	10	C	48.4
11	11	C	82.4
12	12	CH <sub>3</sub>	26.8
13	13	CH <sub>3</sub>	31.2
14	14	CH <sub>3</sub>	17.2
15	15	CH <sub>3</sub>	18.3
1a	1001	C	168.9
1b	1002	CH <sub>3</sub>	20.1
8a	8001	C	164.8
8b	8002	CH	117.5
8g	8007	CH	145.1
8h	8008	C	133.9
8i	8009	CH	128.0
8j	8010	CH	127.7
8k	8011	CH	129.9
8l	8012	CH	127.7
8m	8013	CH	128.0
9a	9001	C	165.7
9b	9002	C	129.9
9c	9003	CH	130.2
9d	9004	CH	128.2
9e	9005	CH	132.6
9f	9006	CH	128.2
9g	9007	CH	130.2

### Estructura

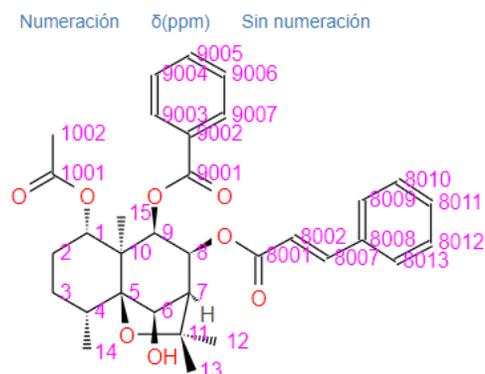


Figura N° 138. Captura NAPROC-13: compuesto 3, clave np08\_1331\_3.

- Estructuras artículo clave: obm09\_5166:

Propiedades			
<b>Nombre Trivial:</b>			
<b>Nombre Sistemático:</b> (1R,2S,4S,5S,6R,7S,8S,9R,10S)-1-Acetoxy-9-benzoyloxy-8-trans-cinnamoyloxy-2,4,6-trihydroxydihydro-β-agarofuran			
<b>Familia :</b> Terpenoids	<b>Grupo :</b> Sesquiterpenoids	<b>Tipo :</b> Agarofurans	
<b>Disolvente :</b> CDCl <sub>3</sub>	<b>Fórmula Molecular :</b> C <sub>33</sub> H <sub>38</sub> O <sub>10</sub>	<b>Peso molecular :</b> 594.355	
<b>Bibliografía :</b> Torres-Romero, D., Muñoz-Martínez, F., Jiménez, I.A., Castanys, S., Gamarro, F., Bazzocchi, I.L. <i>Org Biomol Chem</i> (2009) 7, 5166-72			
Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup> C			
Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	72.4
2	2	CH	67.5
3	3	CH <sub>2</sub>	42.4
4	4	C	72.4
5	5	C	91.3
6	6	CH	77.7
7	7	CH	54.8
8	8	CH	68.9
9	9	CH	72.1
10	10	C	48.7
11	11	C	84.7
12	12	CH <sub>3</sub>	30.4
13	13	CH <sub>3</sub>	27.1
14	14	CH <sub>3</sub>	25.1
15	15	CH <sub>3</sub>	21.7
1a	1001	C	169.6
1b	1002	CH <sub>3</sub>	20.5
8a	8001	C	164.7
8b	8002	CH	117.0
8c	8003	CH	145.3
8d	8004	C	133.8
8e	8005	CH	127.9
8f	8006	CH	128.1
8g	8007	CH	129.1
8h	8008	CH	128.1
8i	8009	CH	127.9
9a	9001	C	165.0
9b	9002	C	130.2
9c	9003	CH	128.5
9d	9004	CH	130.1
9e	9005	CH	133.2
9f	9006	CH	130.1
9g	9007	CH	128.5

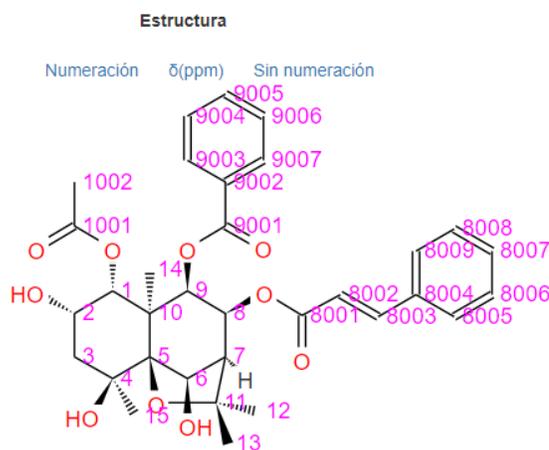


Figura N° 139. Captura NAPROC-13: compuesto 1, clave obm09\_5166\_1.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** ( 1R, 2S , 4S , 5S , 6R, 7R, 8S , 9R, 10S )-1,8-Diacetoxy-6,9-dibenz-oyloxy-2,4-dihydroxydihydro-β-agarofuran

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>33</sub>H<sub>38</sub>O<sub>11</sub>

**Peso molecular :** 610.354

**Bibliografía :** Torres-Romero, D., Muñoz-Martínez, F., Jiménez, I.A., Castanys, S., Gamarro, F., Bazzocchi, I.L. *Org Biomol Chem* (2009) 7, 5166-72

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	72.3
2	2	CH	67.7
3	3	CH <sub>2</sub>	44.0
4	4	C	70.0
5	5	C	91.3
6	6	CH	77.9
7	7	CH	53.6
8	8	CH	68.2
9	9	CH	72.0
10	10	C	49.7
11	11	C	84.7
12	12	CH <sub>3</sub>	30.1
13	13	CH <sub>3</sub>	26.2
14	14	CH <sub>3</sub>	21.6
15	15	CH <sub>3</sub>	25.2
1a	1001	C	169.5
1b	1002	CH <sub>3</sub>	20.5
6a	6001	C	165.5
6b	6002	C	129.0
6c	6003	CH	128.1
6d	6004	CH	130.1
6e	6005	CH	133.2
6f	6006	CH	130.1
6g	6007	CH	128.1
8a	8001	C	168.9
8b	8002	CH <sub>3</sub>	20.4
9a	9001	C	165.5
9b	9002	C	129.4
9c	9003	CH	128.4
9d	9004	CH	130.0
9e	9005	CH	133.2
9f	9006	CH	130.0
9g	9007	CH	128.4

### Estructura

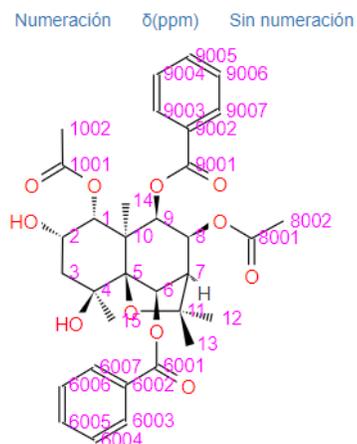


Figura N° 140. Captura NAPROC-13: compuesto 2, clave obm09\_5166\_2.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** (1S,4S,5S,6R,7R,8S,9R,10S)-1,8-Diacetoxy-6,9-dibenzoyloxy-4-hydroxydihydro-β-agarofuran

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>33</sub>H<sub>38</sub>O<sub>10</sub>

**Peso molecular :** 594.355

**Bibliografía :** Torres-Romero, D., Muñoz-Martínez, F., Jiménez, I.A., Castanys, S., Gamarro, F., Bazzocchi, I.L. *Org Biomol Chem* (2009) 7, 5166-72

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	72.1
2	2	CH2	23.0
3	3	CH2	38.6
4	4	C	70.4
5	5	C	91.0
6	6	CH	78.1
7	7	CH	53.5
8	8	CH	68.5
9	9	CH	72.0
10	10	C	49.6
11	11	C	84.5
12	12	CH3	30.1
13	13	CH3	26.2
14	14	CH3	19.4
15	15	CH3	23.6
1a	1001	C	169.6
1b	1002	CH3	20.5
6a	6001	C	165.5
6b	6002	C	129.3
6c	6003	CH	128.2
6d	6004	CH	128.4
6e	6005	CH	133.2
6f	6006	CH	128.4
6g	6007	CH	128.2
8a	8001	C	169.0
8b	8002	CH3	20.5
9a	9001	C	165.4
9b	9002	C	129.0
9c	9003	CH	129.9
9d	9004	CH	130.0
9e	9005	CH	133.2
9f	9006	CH	130.0
9g	9007	CH	129.9

### Estructura

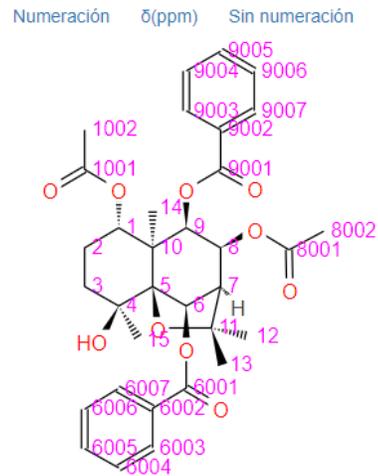


Figura N° 141. Captura NAPROC-13: compuesto 3, clave obm09\_5166\_3.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** (1S, 4S, 5S, 6R, 7R, 8S, 9R, 10S)-1,8-Diacetoxy-9-benzoyloxy-4-hydroxy-6-nicotinoyloxydihydro-β-agarofuran

**Familia:** Terpenoids

**Grupo:** Sesquiterpenoids

**Tipo:** Agarofurans

**Disolvente:** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular:** C<sub>32</sub>H<sub>37</sub>NO<sub>10</sub>

**Peso molecular:** 595.351

**Bibliografía:** Torres-Romero, D., Muñoz-Martínez, F., Jiménez, I.A., Castanys, S., Gamarro, F., Bazzocchi, I.L. *Org Biomol Chem* (2009) 7, 5166-72

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	71.9
2	2	CH <sub>2</sub>	23.0
3	3	CH <sub>2</sub>	38.4
4	4	C	70.6
5	5	C	91.1
6	6	CH	79.0
7	7	CH	53.5
8	8	CH	68.5
9	9	CH	71.9
10	10	C	49.6
11	11	C	84.5
12	12	CH <sub>3</sub>	30.2
13	13	CH <sub>3</sub>	26.1
14	14	CH <sub>3</sub>	19.3
15	15	CH <sub>3</sub>	23.7
1a	1001	C	169.5
1b	1002	CH <sub>3</sub>	20.4
6a	6001	C	163.0
6b	6002	C	128.9
6c	6003	CH	148.3
6d	6004	CH	150.2
6e	6005	CH	123.0
6f	6006	CH	140.4
8a	8001	C	169.0
8b	8002	CH <sub>3</sub>	20.4
9a	9001	C	165.4
9b	9002	C	124.9
9c	9003	CH	128.2
9d	9004	CH	129.9
9e	9005	CH	133.3
9f	9006	CH	129.9
9g	9007	CH	128.2

### Estructura

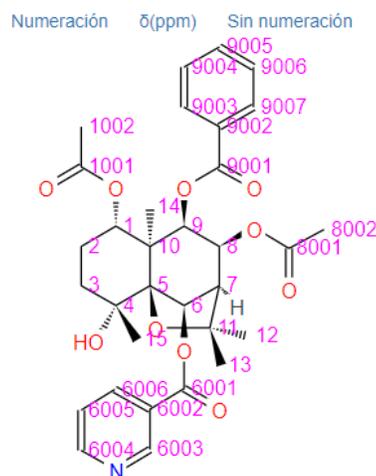


Figura N° 142. Captura NAPROC-13: compuesto 4, clave obm09\_5166\_4.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** (1S, 4S, 5S, 6R, 7S, 8S, 9R, 10S)-1-Acetoxy-9-benzoyloxy-8-cis-cinnamoyloxy-4,6-dihydroxydihydro- $\beta$ -agarofuran

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>33</sub>H<sub>38</sub>O<sub>9</sub>

**Peso molecular :** 578.356

**Bibliografía :** Torres-Romero, D., Muñoz-Martínez, F., Jiménez, I.A., Castanys, S., Gamarro, F., Bazzocchi, I.L. *Org Biomol Chem* (2009) 7, 5166-72

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	$\delta$ (ppm)
1	1	CH	72.1
2	2	CH <sub>2</sub>	22.9
3	3	CH <sub>2</sub>	36.8
4	4	C	72.8
5	5	C	90.9
6	6	CH	78.1
7	7	CH	54.6
8	8	CH	68.8
9	9	CH	71.9
10	10	C	48.7
11	11	C	84.5
12	12	CH <sub>3</sub>	30.3
13	13	CH <sub>3</sub>	26.7
14	14	CH <sub>3</sub>	19.5
15	15	CH <sub>3</sub>	23.5
1a	1001	C	169.6
1b	1002	CH <sub>3</sub>	20.1
8a	8001	C	164.1
8b	8002	CH	118.5
8c	8003	CH	129.9
8d	8004	C	144.3
8e	8005	CH	128.1
8f	8006	CH	128.4
8g	8007	CH	134.4
8h	8008	CH	128.4
8i	8009	CH	128.1
9a	9001	C	165.2
9b	9002	C	129.1
9c	9003	CH	129.5
9d	9004	CH	128.7
9e	9005	CH	133.1
9f	9006	CH	128.7
9g	9007	CH	129.5

### Estructura

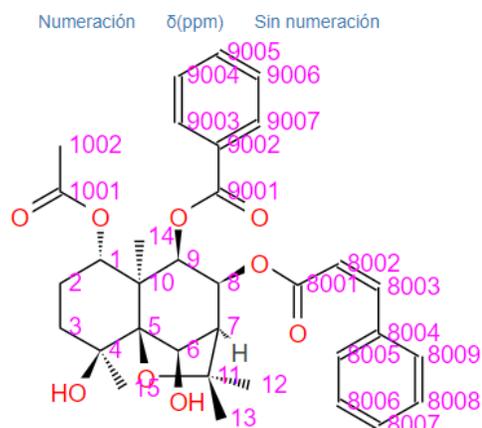


Figura N° 143. Captura NAPROC-13: compuesto 5, clave obm09\_5166\_5.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** (1S, 4S, 5S, 6R, 7R, 8R, 9R, 10S)-1,8-Diacetoxy-9-benzoyloxy-4-hydroxy-6-nicotinoyloxydihydro-β-agarofuran

**Familia:** Terpenoids

**Grupo:** Sesquiterpenoids

**Tipo:** Agarofurans

**Disolvente:** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular:** C<sub>32</sub>H<sub>37</sub>NO<sub>10</sub>

**Peso molecular:** 595.351

**Bibliografía:** Torres-Romero, D., Muñoz-Martínez, F., Jiménez, I.A., Castanys, S., Gamarro, F., Bazzocchi, I.L. *Org Biomol Chem* (2009) 7, 5166-72

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	76.0
2	2	CH <sub>2</sub>	22.9
3	3	CH <sub>2</sub>	38.3
4	4	C	72.1
5	5	C	91.8
6	6	CH	77.6
7	7	CH	52.9
8	8	CH	70.5
9	9	CH	75.4
10	10	C	50.7
11	11	C	83.5
12	12	CH <sub>3</sub>	29.9
13	13	CH <sub>3</sub>	25.1
14	14	CH <sub>3</sub>	19.1
15	15	CH <sub>3</sub>	23.8
1a	1001	C	169.6
1b	1002	CH <sub>3</sub>	20.5
6a	6001	C	162.9
6b	6002	C	133.6
6c	6003	CH	148.3
6d	6004	CH	150.2
6e	6005	CH	123.0
6f	6006	CH	138.1
8a	8001	C	169.1
8b	8002	CH <sub>3</sub>	20.9
9a	9001	C	164.6
9b	9002	C	128.4
9c	9003	CH	129.8
9d	9004	CH	128.3
9e	9005	CH	139.4
9f	9006	CH	128.3
9g	9007	CH	129.8

### Estructura

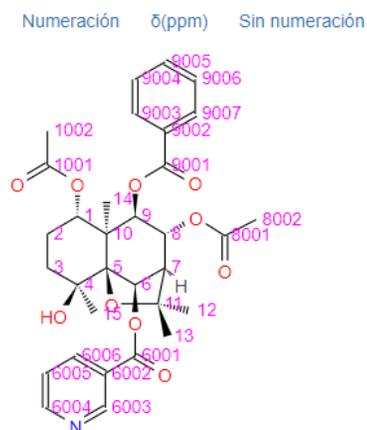


Figura N° 144. Captura NAPROC-13: compuesto 9, clave obm09\_5166\_9.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** ( 1S , 4R, 5S , 6R, 7R, 8S , 9R, 10S ) -1,8-Diacetoxy -6,9-dibenzoyl-oxdihydro-β-agarofuran

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>33</sub>H<sub>38</sub>O<sub>9</sub>

**Peso molecular :** 578.356

**Bibliografía :** Torres-Romero, D., Muñoz-Martínez, F., Jiménez, I.A., Castanys, S., Gamarro, F., Bazzocchi, I.L. *Org Biomol Chem* (2009) 7, 5166-72

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	73.1
2	2	CH <sub>2</sub>	22.4
3	3	CH <sub>2</sub>	26.6
4	4	CH	34.2
5	5	C	89.7
6	6	CH	77.9
7	7	CH	53.6
8	8	CH	69.0
9	9	CH	72.4
10	10	C	48.8
11	11	C	82.7
12	12	CH <sub>3</sub>	31.3
13	13	CH <sub>3</sub>	26.3
14	14	CH <sub>3</sub>	18.5
15	15	CH <sub>3</sub>	17.2
1a	1001	C	169.7
1b	1002	CH <sub>3</sub>	20.5
6a	6001	C	165.1
6b	6002	C	129.4
6c	6003	CH	128.5
6d	6004	CH	128.1
6e	6005	CH	133.1
6f	6006	CH	128.1
6g	6007	CH	128.5
8a	8001	C	169.1
8b	8002	CH <sub>3</sub>	20.5
9a	9001	C	165.5
9b	9002	C	129.1
9c	9003	CH	129.5
9d	9004	CH	129.9
9e	9005	CH	133.3
9f	9006	CH	129.9
9g	9007	CH	129.5

### Estructura

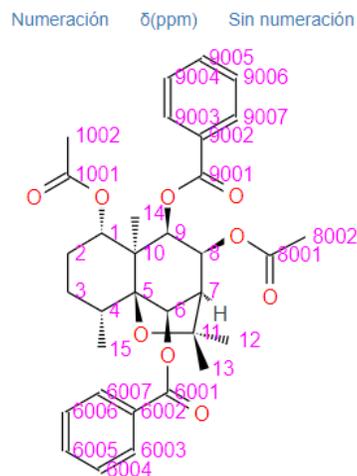


Figura N° 145. Captura NAPROC-13: compuesto 10, clave obm09\_5166\_10.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** (1S,4R,5S,6R,7S,8S,9R,10S)-1-Acetoxy-9-benzoyloxy-8-cis-cinnamoyloxy-6-hydroxydihydro-β-agarofuran

**Familia :** Terpenoids

**Grupo :** Sesquiterpenoids

**Tipo :** Agarofurans

**Disolvente :** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular :** C<sub>33</sub>H<sub>38</sub>O<sub>8</sub>

**Peso molecular :** 562.6523

**Bibliografía :** Torres-Romero, D., Muñoz-Martínez, F., Jiménez, I.A., Castanys, S., Gamarro, F., Bazzocchi, I.L. *Org Biomol Chem* (2009) 7, 5166-72

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	73.4
2	2	CH2	21.4
3	3	CH2	26.6
4	4	CH	33.4
5	5	C	90.8
6	6	CH	77.2
7	7	CH	55.2
8	8	CH	69.4
9	9	CH	72.6
10	10	C	48.5
11	11	C	82.6
12	12	CH3	31.2
13	13	CH3	26.4
14	14	CH3	18.7
15	15	CH3	17.7
1a	1001	C	169.7
1b	1002	CH3	20.6
8a	8001	C	164.3
8b	8002	CH	118.6
8c	8003	CH	144.5
8d	8004	C	134.4
8e	8005	CH	127.8
8f	8006	CH	128.0
8g	8007	CH	132.9
8h	8008	CH	127.8
8i	8009	CH	128.0
9a	9001	C	165.5
9b	9002	C	128.5
9c	9003	CH	129.6
9d	9004	CH	130.0
9e	9005	CH	128.9
9f	9006	CH	129.6
9g	9007	CH	130.0

### Estructura

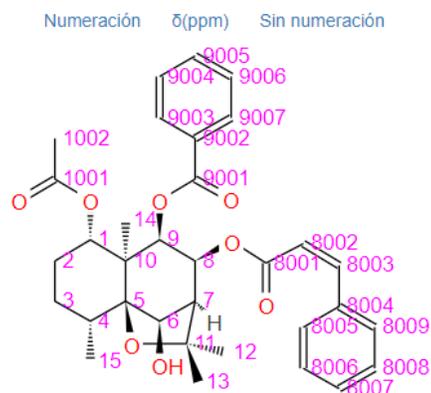


Figura N° 146. Captura NAPROC-13: compuesto 11, clave obm09\_5166\_11.

## Propiedades

**Nombre Trivial:**

**Nombre Sistemático:** (1S,4R,5S,6R,7R,9S,10S)-1-Acetoxy-9-trans-cinnamoyloxy-6-hydroxydihydro-β-agarofuran

**Familia:** Terpenoids

**Grupo:** Sesquiterpenoids

**Tipo:** Agarofurans

**Disolvente:** CDCl<sub>3</sub>

**Fórmula Molecular:** C<sub>26</sub>H<sub>34</sub>O<sub>6</sub>

**Peso molecular:** 442.283

**Bibliografía:** Torres-Romero, D., Muñoz-Martínez, F., Jiménez, I.A., Castanys, S., Gamarro, F., Bazzocchi, I.L. *Org Biomol Chem* (2009) 7, 5166-72

### Desplazamientos Químicos RMN <sup>13</sup>C

Num	Num2	Tipos	δ(ppm)
1	1	CH	73.4
2	2	CH <sub>2</sub>	21.3
3	3	CH <sub>2</sub>	26.6
4	4	CH	33.4
5	5	C	91.0
6	6	CH	77.8
7	7	CH	50.5
8	8	CH <sub>2</sub>	32.1
9	9	CH	73.1
10	10	C	49.7
11	11	C	82.3
12	12	CH <sub>3</sub>	30.8
13	13	CH <sub>3</sub>	26.0
14	14	CH <sub>3</sub>	18.7
15	15	CH <sub>3</sub>	17.8
1a	1001	C	170.0
1b	1002	CH <sub>3</sub>	20.9
9a	9001	C	165.9
9b	9002	CH	117.9
9c	9003	CH	145.0
9d	9004	C	133.3
9e	9005	CH	128.0
9f	9006	CH	128.6
9g	9007	CH	130.1
9h	9008	CH	128.6
9i	9009	CH	128.0

### Estructura

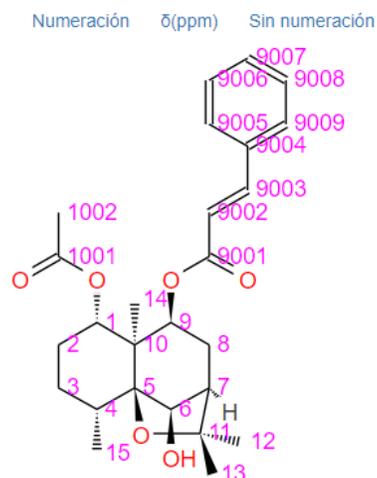


Figura N° 147. Captura NAPROC-13: compuesto 13, clave obm09\_5166\_13.