

## Determinación del coeficiente de partición ( $\log P$ ) para derivados antraquinónicos aislados de *Heterophyllaea pustulata* Hook. f. (Rubiáceas)

Laura R. COMINI <sup>1</sup>, Susana C. NÚÑEZ MONTOYA <sup>1</sup>,  
Gustavo A. ARGÜELLO <sup>2</sup> y José L. CABRERA <sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Farmacia y <sup>2</sup>Departamento de Físico-Química,  
Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba. IMBIV <sup>1</sup>,  
INFIQ <sup>2</sup> - CONICET. Ciudad Universitaria. 5000 Córdoba, Argentina.

---

**RESUMEN.** Las antraquinonas (AQs) aisladas de la especie fototóxica *Heterophyllaea pustulata* Hook. f. (Rubiáceas), soranjidiol, 1-metil éter de soranjidiol, rubiadina, 1-metil éter de rubiadina, damnacantal y damnacantol, son agentes fotosensibilizantes Tipo I y/o Tipo II. A su vez, presentan una potencial aplicación terapéutica debido a que extractos enriquecidos en las mismas y obtenidos a partir de hojas y tallos de *H. pustulata*, demostraron una importante actividad antibacteriana y antifúngica *in vitro* con baja toxicidad aguda *in vivo*. Con el fin de estimar la capacidad de estas AQs para ingresar y distribuirse en el organismo, atravesando membranas biológicas y así, poder desencadenar los efectos biológicos descritos, se determinó el  $\log P$  (expresión logarítmica de la lipofilicidad) de las mismas mediante el método de la ampolla. Con excepción de damnacantol, las AQs ensayadas presentaron un valor superior de  $\log P$  en comparación a metoprolol. Además el valor promedio de  $\log P$  para cada AQ fue comparable al valor obtenido mediante cálculos teóricos (CLogP).

**SUMMARY.** "Partition coefficient ( $\log P$ ) determination of anthraquinone derivatives isolated from *Heterophyllaea pustulata* Hook. f. (Rubiaceae)". The anthraquinones isolated from the phototoxic species *Hetero-phyllaea pustulata* Hook. f. (Rubiaceae), soranjidiol, soranjidiol 1-methyl ether, rubiadin, rubiadin 1-methyl ether, damnacanthol and damnacanthol, are Type I and/or Type II photosensitizers. In addition, they show a potential therapeutic use according to results where extracts enriched in these metabolites and obtained from leaves and stems of *H. pustulata* demonstrated an important antibacterial and antifungal activity *in vitro* with a low acute toxicity *in vivo*. In order to estimate the capacity of these AQs to penetrate into the cells and their body distribution by going through biological membranes with the aim to unleash the described biological effects, we determined the  $\log P$  of each one by using the shake flash technique. Except for damnacanthol, all of the AQs tested showed a higher value of  $\log P$  compared to metoprolol. In addition, the average value of  $\log P$  for each AQ was similar to the theoretical value (CLogP).

---

**PALABRAS CLAVE:** Antraquinonas, Coeficiente de partición, Fotosensibilizantes, *Heterophyllaea pustulata*, Lipofilicidad.

**KEY WORDS:** Anthraquinones, *Heterophyllaea pustulata*, Lipophilicity, Partition coefficient, Photosensitizers.

\* Autor a quien dirigir la correspondencia. E-mail: jcabrera@dco.fcq.unc.edu.ar