

Analise de amostras comerciais de *Casearia sylvestris* através de espectrometria de RMN ¹H e quimiometria

Jhennifer P. Nastro^{1*} (IC), Paula C. P. Bueno¹ (PG), Isabel D. Coutinho¹ (PQ), Nivaldo Boralle¹ (PQ), Ian Castro-Gamboa¹ (PQ), Alberto J. Cavalheiro¹ (PQ), Vanderlan S. Bolzani¹ (PQ).

¹Departamento de Química Orgânica, Instituto de Química, Universidade Estadual Paulista (UNESP), Araraquara. jhennifer110292@aluno.fcfar.unesp.br

Palavras Chave: Quimiometria, RMN, *C. sylvestris*.

Introdução

No Brasil, diversas plantas medicinais são comercializadas e destas, a espécie *Casearia sylvestris* possui grande demanda na América Latina.¹ Para esta espécie são conhecidas duas variedades: *sylvestris* rica em diterpenos e língua que acumula fenólicos. No entanto, árvores com características morfoanatômicas, genéticas e químicas intermediárias também são comuns, mas ainda pouco descritas na literatura^{2,3}.

A espectrometria de RMN aliada a quimiometria tornou-se um método poderoso de análise de plantas medicinais, por permitir a identificação de inúmeras substâncias numa matriz complexa, reproduzíveis em um único experimento.

Uma vez que *C. sylvestris* encontra-se incluída dentre as plantas medicinais do Sistema Único de Saúde (SUS), este trabalho tem como objetivo analisar amostras comerciais de *C. sylvestris* através de RMN ¹H e quimiometria, visando a caracterização do perfil metabólico e o desenvolvimento de uma metodologia de análise de dados para avaliar a composição química das amostras comercializadas.

Resultados e Discussão

Para a realização da análise, foram utilizadas 10 amostras comerciais, adquiridas em triplicata, sendo 7 do estado de São Paulo, 2 do Paraná e 1 do Rio Grande do Norte. Estas amostras foram trituradas com o auxílio de nitrogênio líquido e o pó obtido foi extraído com uma mistura etanol, isopropanol e água (3:2:5) e, em seguida, liofilizado. A partir do extrato bruto, os espectros de RMN ¹H foram obtidos e pré-processados com ajuste de fase, linha de base e calibração pelo TMS.

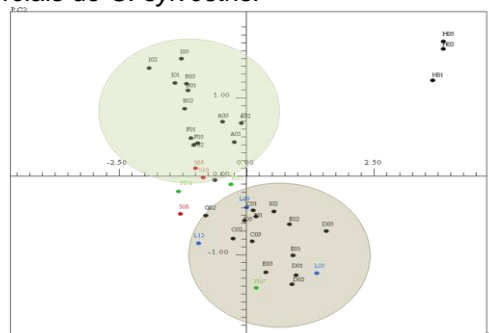
Após os cálculos multifatoriais, a Análise de Componentes Principais (PCA) determinou que o “bucket” não escalonado e a PCA com pré-processamento Pareto é o processamento de dados mais indicado para este estudo. A Figura 1 mostra o gráfico de scores da análise por PCA de espectros de RMN ¹H, no qual as amostras coloridas são os padrões botânicos (três indivíduos diferentes de cada variedade e forma intermediária coletados e identificados de acordo com características morfológicas), e as amostras pretas, em triplicata, são os extratos comerciais, que foram marcadas em grupos de A à J, indicando diferentes fornecedores.

O modelo de PCA foi realizado com 4 componentes, as quais tiveram 79,73% da variância

explicada para PC1xPC2, sendo que para a PC1 e PC2 foi de 44,71% e 19,37%, respectivamente.

Os dados experimentais mostraram uma nítida diferença entre as variedades *sylvestris* (S) e língua (L), em todas as amostras comerciais avaliadas. As amostras comerciais A, B, F e J se identificam com a variedade *sylvestris* por possuírem alto teor de diterpenos tipo casearinas, conforme observado nos espectros de RMN. Já as amostras D, C, E e I apresentaram concentrações elevadas de fenólicos, que caracterizam a variedade língua. A amostra G apresentou alto teor de diterpenos e de fenólicos mostrando-se tratar de forma intermediária (FI), morfoanatomicamente distinta. A amostra H, finalmente, não se identificou com as demais por se tratar de extrato seco e não de folhas desidratadas, o que condiz com o resultado encontrado.

Figura 1. Gráfico de scores PC1xPC2 da análise por PCA de espectros de RMN ¹H das amostras comerciais de *C. sylvestris*.



Conclusões

A metodologia desenvolvida mostrou-se uma ferramenta analítica simples, rápida e eficaz para análise de produtos comerciais de uso humano. Este trabalho demonstra ainda que a RMN ¹H é uma técnica rápida e muito eficiente para registro metabólico de amostras vegetais, sem a necessidade de inúmeros fracionamentos visando purificação, além de ser uma técnica robusta e com fácil preparo de amostra.

Agradecimentos

FAPESP, CAPES e CNPq.

¹Spandre, P.; Zanette, F.; Biasi, L.A.; Koheler, H.S.; Niesing, P.C. *Rev. Bras. Pl. Med.* **2012**, 14, 529.

²Sleumer, H.O. *Flacourtiaceae: flora neotropica*; [monograph number 22]. New York: The New York Botanic Garden, **1980**, 499.

³Cavallari, M. M.; Gimenes, M. A.; Billot, C.; Torres, R. B.; Zucchi, M. I.; Cavalheiro, A. J.; Bouvet, J. M. *Annals of Botany* **2010**, 106, 627.