

Aplicação da espectrometria de massas *tandem* (IES–EM/EM) na identificação de séries homólogas e novos alcalóides piperidínicos co-metabólitos nas flores e frutos de *Senna spectabilis* (Fabaceae)

Marcos Pivatto¹ (PG)*, Débora Senna¹ (IC), Antônio E. M. Crotti² (PQ), Norberto P. Lopes³ (PQ), Ian Castro-Gamboa¹ (PQ), Cláudio Viegas Jr.¹ (PQ), Maysa Furlan¹ (PQ), Vanderlan da S. Bolzani¹ (PQ)

¹Núcleo de Bioensaios, Biossíntese e Ecofisiologia de Produtos Naturais, Instituto de Química, Universidade Estadual Paulista, CP 355, 14801-970, Araraquara-SP, Brasil.

²Núcleo de Pesquisas em Ciências Exatas e Tecnológicas, Universidade de Franca, Av. Dr. Armando Salles de Oliveira 201, 14404-600, Franca-SP, Brasil.

³Departamento de Física e Química, Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Av. Café s/n, 14040-903, Ribeirão Preto-SP, Brasil.

* pivatto@posgrad.iq.unesp.br

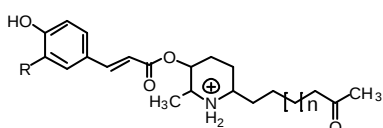
Palavras Chave: *Senna spectabilis*, alcalóides piperidínicos, espectrometria de massas *tandem*

Introdução

Senna spectabilis (sin. *Cassia spectabilis*, Fabaceae - Caesalpiniaceae). Foi recentemente descrita como importante fonte de alcalóides piperidínicos bioativos.^{1,2} Esses metabólitos apresentaram atividade citotóxica moderada¹, analgésica², antiinflamatória³ e anticolinesterásica⁴, sendo, portanto, substâncias de interesse como protótipos de fármacos. Devido a grande variedade de alcalóides acumulados nessa espécie, metodologias de análises rápidas foram desenvolvidas para identificar e diferenciar tais substâncias em matrizes complexas⁵. A ausência de cromóforos na maioria destes metabólitos exigiu a utilização de técnicas alternativas de análise, sendo a espectrometria de massas *tandem* (IES–EM/EM), injeção direta, a mais eficiente para a identificação desses metabólitos nos extratos ou frações semipuras.

Resultados e Discussão

A utilização da técnica IES–EM/EM permitiu observar a presença de novos alcalóides nas flores e frutos de *S. spectabilis*, assim como pares homólogos para grande parte desses metabólitos (Figuras 1 e 2). Também foi possível estabelecer padrões de fragmentação assim como regiões de impressão digital (Figura 3), típica dos alcalóides piperidínicos, de fundamental importância para a descrição do perfil metabolômico em diferentes partes da planta ou para estudos posteriores de desreplicação de outras espécies de *Senna/Cassia*.



- 1: R = H, n = 7, m/z 444
- 2: R = H, n = 9, m/z 472
- 3: R = OCH₃, n = 7, m/z 474
- 4: R = OCH₃, n = 9, m/z 502

Figura 1. Novos alcalóides identificados em *S. spectabilis*

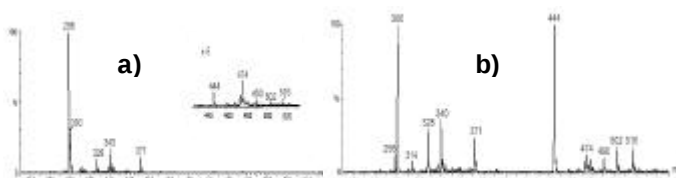


Figura 2. IES-EM da fração alcaloídica das flores (a) e dos frutos (b) de *S. spectabilis*.

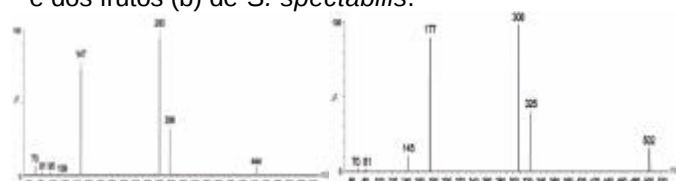


Figura 3. IES–EM/EM de 1 e 4.

Conclusões

Os resultados obtidos indicaram que os alcalóides encontrados nas flores são mais oxidados que aqueles dos frutos, existindo uma predominância de metabólitos com a cadeia lateral contendo 12 átomos de carbono (n = 7). Fica evidente neste trabalho a importância da espectrometria de massas *tandem* para análises rápidas de perfil metabolômico de extratos ou frações semipuras.

Agradecimentos

À FAPESP, BIOTA-FAPESP, CAPES e CNPq pelo auxílio à pesquisa e bolsas concedidas.

¹ Bolzani, V. S.; Gunatilaka, A. A. L.; Kingston, D. G. I. *Tetrahedron*, 1995, 51, 5929.

² Viegas Junior, C.; Bolzani, V. S.; Barreiro, E. J.; Young, M. C. M.; Furlan, M.; Tomazela, D.; Eberling, M. N. *J. Nat. Prod.* 2004, 67, 908.

³ Moreira, M. S. A.; Viegas Júnior, C.; Miranda, A. L. P.; Bolzani, V. S.; Barreiro, E. J. *Planta Med.* 2003, 69, 795.

⁴ Viegas Junior, C.; Bolzani, V. S.; Pimentel, L. S. B.; Castro, N. G.; Cabral, R. F.; Costa, R. S.; Floyd, C.; Rocha, M. S.; Young, M. C.

M.; Barreiro, E. J.; Fraga, C. A. M. *Bioorg. Med. Chem.* 2005, 13, 4184.

⁵ Pivatto, M.; Crotti, A. E. M.; Lopes, N. P.; Castro-Gamboa, I.; Rezende, A. de; Viegas Júnior, C.; Young, M. C. M.; Furlan, M.; Bolzani, V. S. *J. Braz. Chem. Soc.* 2005, 16, 1431.