

# Espectroscopia Raman na identificação dos alcaloides Pereirina e Flavopereirina: da planta ao fitoterápico

Lenize F. Maia<sup>a\*</sup> (PQ), Vanessa End de Oliveira<sup>a</sup> (PG), Márcia R. Almeida<sup>b</sup> (PG), Jussara P. Barbosa<sup>c</sup> (PQ), Angelo C. Pinto<sup>b</sup> (PQ) e Luiz Fernando C. de Oliveira<sup>a</sup> (PQ) \*lenmaia@uol.com.br

<sup>a</sup>Núcleo de Espectroscopia e Estrutura Molecular, Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Juiz de Fora, 36036-330, Juiz de Fora-MG, Brazil. <sup>b</sup>Departamento de Química Orgânica, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Ilha do Fundão, 21945-970, Rio de Janeiro-RJ, Brazil. <sup>c</sup>Fundação Oswaldo Cruz, Instituto Oswaldo Cruz. Pavilhão Leônidas Deane, 604, Manguinhos 21040-900 - Rio de Janeiro, RJ – Brasil.

Palavras Chave: alcaloides, Espectroscopia Raman, pereirina, flavopereirina.

## Introdução

A pereirina (P) é o primeiro alcaloide isolado no Brasil, no século XIX, extraído das cascas de *Geissospermum vellosii* Alemão, popularmente conhecida com pau-pereira<sup>1</sup>. É conhecida pelo seu potencial farmacológico no combate a doenças virais como AIDS, herpes e hepatite C<sup>1</sup>. Além da pereirina, *Geissospermum spp.* produz a flavopereirina (FP), com propriedades anticancerígenas<sup>2</sup>. Cascas, chás e extratos das cascas de Pau-pereira são amplamente utilizados pela população para fins medicinais<sup>1</sup>.

Neste trabalho investigamos através de espectroscopia Raman (ER) a presença/ausência dos princípios ativos P e FP nas cascas obtidas de 22 fontes comerciais e métodos de preparação como extrato bruto, infusão e conteúdo das cápsulas dos fitoterápicos<sup>3,4</sup>.

## Resultados e Discussão

Os espectros Raman das amostras estudadas foram obtidos em um espectrômetro RFS 100 FT-Raman Bruker, com linha de excitação em 1064 nm usando laser Nd:YAG. A análise exploratória dos dados foi feita através da análise dos componentes principais (PCA) utilizando o software MATLAB 6.5. As medidas foram feitas com as substâncias puras pereirina (P) e flavopereirina (FP), *in situ* (cascas), com extratos etanólicos, infusões, e conteúdo de cápsulas dos fitoterápicos PP40 e PAOV. A pereirina é um alcaloide indólico que também contém uma porção quinuclidínica (Figura 1).

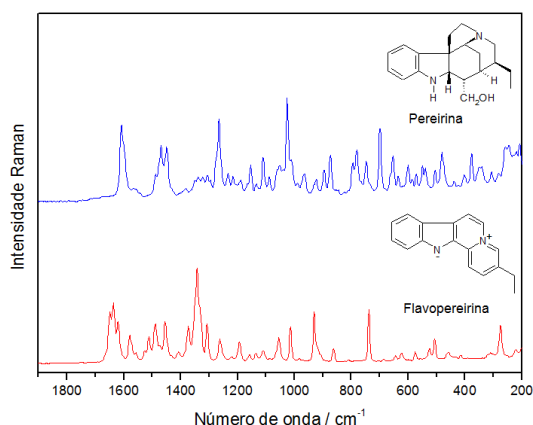


Figura 1. Espectros Raman dos alcaloides indicados.

As principais bandas correspondentes ao núcleo indólico foram observadas em 1609 e 1322  $\text{cm}^{-1}$  atribuídas aos estiramentos do anel aromático/C-C em 1470  $\text{cm}^{-1}$ . As deformações NH/C-C são observadas em 1154  $\text{cm}^{-1}$  e as  $\delta$ (anel aromático, respiração do anel)

em 780, 875 e 1025  $\text{cm}^{-1}$ . Bandas atribuídas ao núcleo quinuclidínico foram observadas em 1470  $\text{cm}^{-1}$   $\nu(\text{CH}_2)$  e os modos  $\nu(\text{C-N+C-C})$  em 1382  $\text{cm}^{-1}$ . A flavopereirina é composta de um núcleo indólico e um quinolizidínico. Bandas características do grupo indólico foram observadas em 1620 e 1579  $\text{cm}^{-1}$  ( $\nu$  anel aromático),  $\nu(\text{C=N})$  em 1513  $\text{cm}^{-1}$ , 1488  $\text{cm}^{-1}$  ( $\nu$  anel aromático), 1342  $\text{cm}^{-1}$  ( $\nu$  C-N aromático) e 1014  $\text{cm}^{-1}$  (respiração do indol). O grupo quinolizidínico foi caracterizado através das bandas em 1638  $\text{cm}^{-1}$   $\nu(\text{C-C})$ , 1579  $\text{cm}^{-1}$   $\nu(\text{C=N/C-C})$ , 1455  $\text{cm}^{-1}$   $\delta(\text{CH})$  e 1154  $\text{cm}^{-1}$   $\delta(\text{C-N})$ . As atribuições propostas para as substâncias puras foram comparadas às 49 amostras que incluem cascas, extratos brutos, infusões e fitoterápicos. A grande maioria das amostras mostrou um perfil de bandas Raman muito semelhante às bandas principais dos dois alcaloides. De acordo com a análise dos dados do tratamento por PCA representados no gráfico de escores dos dois primeiros componentes (PC1 e PC2) foi possível observar a formação de grupos de amostras que apresentaram maior e menor semelhança com os padrões P e FP. O gráfico de *loadings* da PC1 versus número de onda mostrou que as bandas em 1640, 1608, 1461  $\text{cm}^{-1}$ , além de bandas entre 650-476  $\text{cm}^{-1}$ , foram as que apresentaram maior contribuição para a determinação da similaridade. O agrupamento de variáveis mostrou que amostras de 17 fontes comerciais que incluem cascas, extratos e infusões (60% das amostras analisadas), foram as que apresentaram maior semelhança com os padrões P e FP. A presença dos princípios ativos nas infusões analisadas indicou que a forma de administração como chás mantém as propriedades que geram a bioatividade. Os espectros dos fitoterápicos PP40 e PAOV também mostraram boa coincidência com os padrões.

## Conclusões

Este estudo mostrou que alcaloides como pereirina e flavopereirina podem ser eficientemente identificados *in situ* e em fitoterápicos através da espectroscopia Raman. A técnica se mostrou adequada para estudos qualitativos dos alcaloides, com vantagens na economia de tempo de análise, utilização de pequenas quantidades de amostra e versatilidade quanto ao estado físico da amostra.

## Agradecimentos

CNPq, CAPES, PRO-INFRA, FAPEMIG, FAPERJ.

<sup>1</sup>Almeida, M.R.; Lima, J.A.; Santos, N.P.; Pinto, A.C. *Rev. Bras. Farm.* **2009**, *19*, 942.

<sup>2</sup>Beljanski, M. *Gen. Mol. Biol.* **2000**, *23*, 29.

<sup>3</sup>[www.supersmart.com/pt-PP-40-Imunitario-0385](http://www.supersmart.com/pt-PP-40-Imunitario-0385)

<sup>4</sup>[www.natural-source.com/francais/paov.php](http://www.natural-source.com/francais/paov.php)