

## Identificação dos isômeros eritratina e 11-metoxi-erisodina através dos espectros UV-VIS e cálculos teóricos.

Daniely X. Soares(PG), Arnaldo F. Silva (PG)<sup>1</sup> e Roy E. Bruns (PQ)<sup>1</sup>. Ieda S. Scarminio(PG)<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, CP 6154 13083-970, Campinas, SP, Brasil.

<sup>2</sup>Universidade Estadual de Londrina, Londrina, PR, Brasil.

Palavras Chave:espectroscopia UV-Vis, cálculo teórico, alcaloides.

### Introdução

A *Erythrina speciosa* é popularmente usada no combate a disenteria e asma e possui atividade ansiolítica.Sua atividade biológica são atribuídas aos alcaloides presentes como constituintes majoritários na planta, por isso há grande interesse no estudo dos seus alcaloides. Dois alcaloides conhecidos são eritratina (5) e seu isomero 11-metoxi-erisodina (2). Esses alcaloides de esqueleto eritrinico com sistema spiro único se diferenciam pela posição da hidroxila.O objetivo desse trabalho foi determinar qual alcaloide aparece na planta em maior quantidade com base em cálculos teóricos e das bandas de absorção máximas encontradas experimentalmente nos extratos da planta.

### Resultados e Discussão

O extrato da planta foi analisado por espectroscopia UV-Vis. Os extratos foram preparados usando 2g de flores da planta para 60 mL de solvente. Três extratos foram originados, um em etanol, um em diclorometano e um em hexano.Os espectros foram analisados e determinados seus comprimentos de onda de absorção máxima.

A geometria de ambos os isômeros (enumerados 2 e 5) foi determinada através do funcional híbrido B3LYP com a função de base 6-311+G(d,p) . A Figura 1 mostra as geometrias otimizadas de ambos os isômeros no nível de cálculo mencionado.

Uma vez que as extrações foram realizadas em solventes de diferentes polaridades (metanol, clorofórmio e hexano) foi utilizado o modelo de PCM implementado no GAUSSIAN03. Para o cálculo utilizando o hexano como solvente, um potencial dielétrico estático de 1,882 foi empregado. Para obter as energias de excitação verticais foi empregada a Teoria do Funcional de Densidade dependente do tempo (TDDFT), no mesmo nível utilizado na otimização da geometria molecular. Todo o arranjo para estes cálculos foi descrito<sup>1</sup> para reproduzir os espectros UV- VIS de vários cromóforos orgânicos em um acordo muito próximo com dados experimental.

A Tabela 1 mostra a comparação entre os comprimentos de absorção experimentais e as obtidas teoricamente.

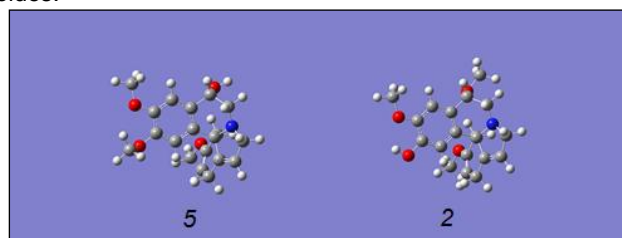


Figura 1. Geometrias otimizadas dos isômeros 5 e 2

Tabela 1. Comparação entre os comprimentos de onda das absorções das transições pi-pi\*, obtidas experimentalmente e teoricamente

Solvente	2	5	Exp.
etanol	282,7	273,2	271
clorofórmio	282,2	273,4	282
hexano	281,5	272,6	270

Quando se avalia a tabela 1 observamos que apesar do fato da medida experimental ser feita na presença de diversas substâncias, existe um acordo muito bom do pico de absorvância com os valores calculados de 2 e 5.

É possível notar pela Tabela 1 que os solventes afetam muito pouco o comprimento de onda de absorção de ambos os isômeros. Independente do solvente utilizado a frequência de absorção não varia mais de 1 nm.

Cálculos complementares mostram que a posição da hidroxila do anel benzênico em 2 não é fundamental para a absorção. Quando ela se encontra em –orto em etanol sua absorção é 282,7 nm, e quando ela se encontra em –meta a absorção é de 282,5.

### Conclusões

Os cálculos teóricos foram capazes de estimar com precisão os valores experimentais muito bem. Pela comparação entre os espectros teóricos e experimentais, é possível afirmar que apenas quando o clorofórmio é utilizado como solvente o isômero 2 é extraído em maior quantidade

### Agradecimentos

Capes, CNPq e FAPESP.

<sup>1</sup> J. P. Nostrand, V. Romanov et al, Int. J. Mass. Spectrom.129. (2013)