

## Caracterización por espectroscopia FTIR del extracto etanólico de *Brugmansia arborea*

### Characterization by FTIR spectroscopy of the ethanol extract of *Brugmansia arborea*

Edder Jovani Romero Villegas, Emmanuel De La O Cuevas, Edgar León Esparza Ibarra, Alejandra Serrano Puente, Perla Ivonne Gallegos Flores\*

Laboratorio de Biotecnología y Medio Ambiente, Unidad Académica de Ciencias Biológicas, Universidad Autónoma de Zacatecas. Campus II. Av. Preparatoria S/N. Col. Progreso, CP 98060. Zacatecas, Zacatecas.

Autor de correspondencia: [ivonne\\_gf@uaz.edu.mx](mailto:ivonne_gf@uaz.edu.mx)

#### RESUMEN

*Brugmansia arborea*, es un arbusto que pertenece a la familia de las Solanaceas, esta familia botánica es conocida por contener un amplio rango de metabolitos secundarios; sobre todo los alcaloides, derivados de los grupos del tropano, amidas, flavonoides y terpenos; estos compuestos tienen efectos nutraceuticos y farmacológicos, que son aplicados en medicina tradicional. El objetivo del trabajo fue caracterizar el extracto etanólico de las flores de *Brugmansia arborea* por espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier (FTIR). Se preparó un extracto etanólico con las flores de la planta a partir del cual se realizó una caracterización química cualitativa (pruebas físicas, organolépticas y espectroscopia FTIR). Como resultados se encontró un pH ácido (5.7) y un rendimiento de 63%, para la caracterización por espectroscopia FTIR, se detectaron diferentes grupos funcionales, de los más importantes centrados en las bandas de 1040 y 1595  $\text{cm}^{-1}$  relacionados con las vibraciones moleculares provenientes de flavonoides y alcaloides, respectivamente. Utilizando espectroscopia FTIR, fue posible identificar las vibraciones moleculares de diversos grupos funcionales asociados a ciertos principios activos presentes en el extracto etanólico de *Brugmansia arborea* y con ello elucidar su abundancia en el extracto.

**Palabras clave:** *Brugmansia arborea*, extracto etanólico, espectroscopia FTIR.

#### INTRODUCCIÓN

Las plantas utilizadas en medicina tradicional, contienen una amplia gama de principios activos (PA) que han sido utilizados para tratar enfermedades crónicas e infecciosas, además, durante mucho tiempo los PA se han implementado como fuente primaria para la síntesis de fármacos; entre los que se puede citar la digoxina, que es un glucósido cardiotónico, usado en enfermedades cardíacas, el cual ha sido aislado a partir de la planta *Digitalis lanata* o los salicilatos extraídos a partir de la corteza del sauce (Sen y

#### ABSTRACT

*Brugmansia arborea* is a shrub that belongs to the Solanaceae family. This botanical family is known to contain a wide range of secondary metabolites; especially alkaloids, derived from the tropane groups, amides, flavonoids and terpenes; these compounds have nutraceutical and pharmacological effects, which are applied in traditional medicine. The objective of the work was to characterize the ethanolic extract of *Brugmansia arborea* flowers by Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR). An ethanolic extract was prepared with the flowers of the plant from which a qualitative chemical characterization was carried out (physical, organoleptic tests and FTIR spectroscopy). As results, an acidic pH (5.7) and a yield of 63% were found. For characterization by FTIR spectroscopy, different functional groups were detected, the most important of which were centered on the bands of 1040 and 1595  $\text{cm}^{-1}$  related to molecular vibrations coming from flavonoids and alkaloids, respectively. Using FTIR spectroscopy, it was possible to identify the molecular vibrations of various functional groups associated with certain active ingredients present in the ethanolic extract of *Brugmansia arborea* and thereby elucidate their abundance in the extract.

**Keywords:** *Brugmansia arborea*, ethanolic extract, FTIR spectroscopy.

#### INTRODUCTION

Plants used in traditional medicine contain a wide range of active ingredients (AP) that have been used to treat chronic and infectious diseases. Furthermore, for a long time, AP have been implemented as a primary source for the synthesis of drugs; among which we can mention digoxin, which is a cardiotonic glycoside, used in heart diseases, which has been isolated from the *Digitalis lanata* plant or salicylates extracted from willow bark (Sen and Samanta,

Samanta, 2015). Los PA pueden ser de naturaleza química diversa con un gran número de propiedades nutraceuticas y/o farmacológicas, tales como antioxidantes, antibacterianas, antivirales, antiinflamatorias, sedantes, alucinógenas, entre otras (Sharma *et al.*, 2017), por lo que a través de los años se ha generado la necesidad de identificar los PA responsables de los efectos farmacológicos en el hombre (Guiche *et al.*, 2015).

Las especies del género *Brugmansia*, son grandes arbustos perennes o árboles pequeños de aproximadamente 11 m de altura, su tallo es semileñoso, las hojas son alternadas y a menudo cubiertas de pelos finos, sus flores tienen forma de trompeta y miden entre 20 y 35 cm de largo, son fragantes, colgantes y tienen diferentes colores como el amarillo, blanco, rojo, rosa y naranja (Algradi *et al.*, 2021). *Brugmansia arborea*, es un arbusto originario de América del Sur y ampliamente cultivado en Europa como especie ornamental; pertenece a la familia de las Solanaceas, esta familia botánica es conocida por contener una amplia variedad de metabolitos secundarios; sobre todo los alcaloides derivados de los grupos del tropano, nicotino e higrina; amidas, varios grupos de esteroides; flavonoides; y di y tri terpenos. Todos estos compuestos son de particular interés en el campo de la medicina y de la toxicología, ya que los compuestos derivados del tropano son un amplio grupo de más de 200 compuestos que tienen efecto anticolinérgico (Nencini *et al.*, 2006). En toda la planta de *B. arborea*, se pueden encontrar diferentes alcaloides como: escopolamina, norescopolamina, aposcopolamina, metelodina e hiosciamina, entre los más descritos, aunque se ha registrado que la mayor proporción es de escopolamina en un 80%. La escopolamina, es un alcaloide tropánico, cuya farmacodinamia presenta efectos sedantes, antieméticos y amnésicos centrales, sin embargo en dosis elevadas puede causar [psicosis](#) o muerte por [parálisis](#) de la [músculatura lisa](#) (Renner *et al.*, 2005; Mattioli *et al.*, 2012).

La espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier (FTIR, Fourier Transform Infrared Spectroscopy) es una técnica analítica utilizada para identificar y cuantificar la presencia de compuestos químicos en una muestra. Esta técnica se basa en el hecho de que las moléculas tienen vibraciones únicas que generan patrones de absorción de energía infrarroja. En la espectroscopia FTIR, se aplica una radiación infrarroja a la muestra y se mide la cantidad de energía que se absorbe en diferentes longitudes de onda. El espectro resultante es una representación gráfica de la cantidad de energía que se absorbe en función de la longitud de onda y de las vibraciones moleculares; por lo que cada compuesto químico tiene un patrón de absorción de energía infrarroja único, que se puede utilizar para identificar la presencia y cantidad de ese compuesto en la muestra

2015). PAs can be of diverse chemical nature with a large number of nutraceutical and/or pharmacological properties, such as antioxidants, antibacterial, antiviral, anti-inflammatory, sedative, hallucinogenic, among others (Sharma *et al.*, 2017), so through Over the years, there has been a need to identify the APs responsible for pharmacological effects in humans (Guiche *et al.*, 2015).

Species of the genus *Brugmansia* are large perennial shrubs or small trees approximately 11 m high, their stem is semi-woody, the leaves are alternate and often covered with fine hairs, their flowers are trumpet-shaped and measure between 20 and 35 cm in length. long, they are fragrant, pendulous and have different colors such as yellow, white, red, pink and orange (Algradi *et al.*, 2021). *Brugmansia arborea* is a shrub native to South America and widely cultivated in Europe as an ornamental species; It belongs to the Solanaceae family, this botanical family is known for containing a wide variety of secondary metabolites; especially alkaloids derived from the tropane, nicotine and hygrin groups; amides, various groups of steroids; flavonoids; and di and tri terpenes. All of these compounds are of particular interest in the field of medicine and toxicology, since compounds derived from tropane are a large group of more than 200 compounds that have anticholinergic effects (Nencini *et al.*, 2006). Throughout the *B. arborea* plant, different alkaloids can be found such as: scopolamine, norescopolamine, aposcopolamine, metelodine and hyoscyamine, among the most described, although it has been recorded that the highest proportion is 80% scopolamine. Scopolamine is a tropane alkaloid, whose pharmacodynamics present central sedative, antiemetic and amnesic effects; however, in high doses it can cause psychosis or death due to smooth muscle paralysis (Renner *et al.*, 2005; Mattioli *et al.*, 2012).

Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FTIR) is an analytical technique used to identify and quantify the presence of chemical compounds in a sample. This technique is based on the fact that molecules have unique vibrations that generate infrared energy absorption patterns. In FTIR spectroscopy, infrared radiation is applied to the sample and the amount of energy that is absorbed at different wavelengths is measured. The resulting spectrum is a graphical representation of the amount of energy that is absorbed as a function of wavelength and molecular vibrations; so each chemical compound has a unique infrared energy absorption pattern, which can be used to identify the presence and amount of that compound in the sample (Hadjiivanov *et al.*, 2021).

FTIR spectroscopy is widely used to detect, through its molecular vibrations, and quantify a wide variety of functional groups present in a sample, which can be related to specific molecules present in a mixture, allowing their

(Hadjiivanov *et al.*, 2021).

La espectroscopia FTIR es ampliamente utilizada para detectar, a través de sus vibraciones moleculares, y cuantificar una amplia variedad de grupos funcionales presentes en una muestra, los cuales se pueden relacionar con moléculas específicas presentes en una mezcla, permitiendo su identificación y cuantificación (Sun *et al.*, 2010). El objetivo de este trabajo fue caracterizar el extracto etanólico de *Brugmansia arborea* utilizando espectroscopia FTIR para identificar los diferentes grupos funcionales presentes en el extracto y relacionarlos con la presencia, ausencia y/o abundancia de los diversos metabolitos presentes en el extracto.

## MATERIALES Y MÉTODOS

### Preparación del extracto etanólico de *Brugmansia arborea*

Como material vegetal, se utilizaron las flores de *Brugmansia arborea*, las cuales fueron recolectadas de una jardinera ornamental en el centro histórico de la ciudad de Zacatecas, Zac (coordenadas: 22°46'23.0"N 102°34'28.3"W), en el mes de febrero del 2022. Se recolectaron 500 gr de flores (peso fresco), las cuales se enjuagaron con agua destilada para remover partículas de polvo, se retiró el exceso de agua dejando escurrir sobre papel absorbente, posteriormente las flores se dejaron secar a 45°C en un horno Thermo Scientific durante 48 h, una vez deshidratadas se trituraron en un mortero para obtener un polvo fino y así aumentar la superficie de contacto con el solvente. La extracción etanólica, se realizó utilizando una relación de 25 g de material vegetal por cada 200 mL de etanol al 80%, la mezcla se colocó en un frasco color ámbar y se maceró durante 30 días, con agitación de manera manual cada tres días, finalmente se filtró el extracto a través de papel filtro con tamaño de poro de 8 µm. El extracto fue recuperado en un frasco color ámbar, etiquetado y resguardado a una temperatura de 20 a 25 °C por 30 días para su posterior análisis.

### Características organolépticas y físicas del extracto

Se registraron los parámetros organolépticos de color, olor, precipitado; así como características físicas de grados Brix (°Bx), pH y densidad (Sosa-López *et al.*, 2017). El rendimiento del extracto fue obtenido a partir de la ecuación 1 (Benítez *et al.*, 2019).

$$\%R = \frac{V_f}{V_i} \times 100$$

Donde: %R, hace referencia al porcentaje de rendimiento, Vf es el volumen final del extracto filtrado y Vi es el volumen inicial del extracto.

identification and quantification (Sun *et al.*, 2010). The objective of this work was to characterize the ethanolic extract of *Brugmansia arborea* using FTIR spectroscopy to identify the different functional groups present in the extract and relate them to the presence, absence and/or abundance of the various metabolites present in the extract.

## MATERIALS AND METHODS

### Preparation of the ethanolic extract of *Brugmansia arborea*

As plant material, *Brugmansia arborea* flowers were used, which were collected from an ornamental planter in the historic center of the city of Zacatecas, Zac (coordinates: 22°46'23.0"N 102°34'28.3"W), in the month of February 2022. 500 g of flowers (fresh weight) were collected, which were rinsed with distilled water to remove dust particles, the excess water was removed and allowed to drain on absorbent paper, then the flowers were left to dry. at 45°C in a Thermo Scientific oven for 48 h, once dehydrated they were crushed in a mortar to obtain a fine powder and thus increase the contact surface with the solvent. The ethanol extraction was carried out using a ratio of 25 g of plant material per 200 mL of 80% ethanol. The mixture was placed in an amber bottle and macerated for 30 days, with manual stirring every three days. Finally, the extract was filtered through filter paper with a pore size of 8 µm. The extract was recovered in an amber bottle, labeled and stored at a temperature of 20 to 25 °C for 30 days for subsequent analysis.

### Organoleptic and physical characteristics of the extract

The organoleptic parameters of color, odor, and precipitate were recorded; as well as physical characteristics of degrees Brix (°Bx), pH and density (Sosa-López *et al.*, 2017). The yield of the extract was obtained from equation 1 (Benítez *et al.*, 2019).

$$\%R = \frac{V_f}{V_i} \times 100$$

Where: %R, refers to the percentage of yield, Vf is the final volume of the filtered extract and Vi is the initial volume of the extract.

### Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FTIR).

Tres mL of the extract was evaporated in an Eppendorf rotary evaporator for 24 h at 30 °C, the recovered extract paste was used for FTIR measurements. The FTIR analysis was carried out on a Thermo Scientific Nicolet iS50 FT-IR equipment, equipped with a glass diamond to perform measurements of solid samples by ATR (Attenuated Total Reflectance), a small amount of the recovered paste was used and was deposited on the diamond crystal, where the spectral

**Espectroscopia Infrarroja con Transformada de Fourier (FTIR).**

Se evaporaron 3 mL del extracto en un rotaevaporador Eppendorf durante 24 h a 30 °C, la pasta del extracto recuperada, se utilizó para las mediciones FTIR. El análisis FTIR se realizó en un equipo Thermo Scientific Nicolet iS50 FT-IR, equipado con un diamante de cristal para realizar mediciones de muestras sólidas por ATR (Reflectancia Total Atenuada), se utilizó una pequeña cantidad de la pasta recuperada y fue depositada sobre el cristal de diamante, donde se realizó la adquisición espectral de 32 scans, con una resolución espectral de 4 cm<sup>-1</sup>, en el intervalo de 500-4000 cm<sup>-1</sup>. El espectro de trabajo fue el promedio de 6 espectros colectados.

**RESULTADOS Y DISCUSIÓN**

El análisis de las características organolépticas y físicas, tienen gran importancia en la tipificación de los extractos; ya que estas características se encuentran relacionadas al tipo de planta, metodología de extracción y las condiciones medio ambientales del lugar de origen (Vokou *et al.*, 1993; Sosa-López *et al.*, 2017). En la tabla 1, se muestran las características organolépticas y físicas del extracto etanólico de *Brugmansia arborea*, el cual presentó un aspecto líquido y una coloración ámbar, esto posiblemente ocasionado por la oxidación del material vegetal cuando fue deshidratado.

acquisition of 32 scans was carried out, with a spectral resolution of 4 cm<sup>-1</sup>, in the interval of 500-4000 cm<sup>-1</sup>. The working spectrum was the average of 6 collected spectra.

**RESULTS AND DISCUSSION**

The analysis of the organoleptic and physical characteristics is of great importance in the typing of the extracts; since these characteristics are related to the type of plant, extraction methodology and the environmental conditions of the place of origin (Vokou *et al.*, 1993; Sosa-López *et al.*, 2017). Table 1 shows the organoleptic and physical characteristics of the ethanolic extract of *Brugmansia arborea*, which presented a liquid appearance and an amber color, this possibly caused by the oxidation of the plant material when it was dehydrated.

A value of 26.6 °Bx was obtained; This data indicates the amount of dissolved carbohydrates in a liquid, where one degree Brix corresponds to 1 g of sucrose/100 g of solution; Therefore, the °Brix value that was recorded in the extract may be related to the sweet aroma it presented; Currently, the type of carbohydrates that are present in *B. arborea* has not been documented in the literature; however, in the phytochemical analysis of the ethanolic extract of the genus *Brugmansia*, the presence of glycosides, which are molecules formed by a carbohydrate, has been reported (mostly monosaccharides) and a non-glucidic compound, mainly flavonol glycosides (Geller *et al.*, 2014; kim *et al.*,

**Tabla 1.** Características organolépticas y físicas organolépticas del extracto.

**Table 1.** Organoleptic characteristics of the extract.

<b>Extracto etanólico de <i>Brugmansia arborea</i></b>	
<b>Precipitado</b>	Nulo
<b>Aspecto</b>	Líquido
<b>Color</b>	Ámbar
<b>Olor</b>	Dulce
<b>pH</b>	5.68
<b>°Bx</b>	26.6
<b>% de Rendimiento</b>	63.5
<b>Densidad (gr/mL)</b>	0.8774

Se obtuvo un valor de 26.6 °Bx; este dato indica la cantidad de carbohidratos disueltos que hay en un líquido, donde un grado Brix corresponde a 1 gr de sacarosa/100 gr de solución; por lo que el valor de °Brix que se registró en el extracto puede estar relacionado con el aroma dulce que presentó; actualmente en la literatura no se ha documentado el tipo de carbohidratos que están presentes en *B. arborea*, sin embargo, en el análisis fitoquímico del extracto etanólico del género *Brugmansia*, se ha reportado la presencia de glucósidos, que son moléculas formadas por un glúcido

2018; Algradi *et al.*, 2021), which have anti-inflammatory and antioxidant effects (kim *et al.*, 2020). The *Brugmansia* genus, because it has a sweet aroma and the structural characteristics of the flower, make it pleasant to the eye, so it is common for there to be concern about being consumed, causing accidental poisoning due to ingestion, this effect is caused by the high concentration of tropane alkaloids. The main effects of poisoning are mydriasis, confusion, tachycardia, dry mouth, dizziness, dry skin, and delirium (Doan *et al.*, 2019). Perez *et al.* (2012) reported the case of

(mayormente monosacáridos) y un compuesto no glucídico, principalmente son glucósidos de flavonol (Geller *et al.*, 2014; kim *et al.*, 2018; Algradi *et al.*, 2021), que tienen efecto antiinflamatorio y antioxidante (kim *et al.*, 2020). El género *Brugmansia*, debido a que tiene un aroma dulce y las características estructurales propias de la flor, la hacen agradable a la vista, por lo que es común que exista inquietud por ser consumida, ocasionando intoxicaciones accidentales por ingestión, este efecto es propiciado por la alta concentración de los alcaloides tropánicos. Los principales efectos de intoxicación son midriasis, confusión, taquicardia, sequedad de boca, mareos, piel seca y delirio (Doan *et al.*, 2019). Perez *et al.* (2012) reportaron el caso de pacientes con intoxicación, los cuales estuvieron previamente en exposición de la planta y esto generó anisocoria.

El pH del extracto fue ácido (5.68), con una densidad de 0.8774 g/mL, la cual es menor a la densidad del agua (1 g/mL). El porcentaje de rendimiento se obtuvo a partir de la ecuación 1, registrando el 63.5 % de rendimiento del volumen del extracto. Como ya se hizo mención anteriormente, algunas características propias de los extractos están relacionadas al tipo de planta y la metodología de extracción, Pesewu *et al.* (2008), reportaron que los rendimientos para extractos alcohólicos de la planta de orégano se encuentran entre un 3.2 y 16%; Metoui *et al.* (2015), reportaron rendimientos para extractos alcohólicos de *Citrus aurantium L.* de 18.3%; González (2004), documentó el rendimiento de los extractos etanólicos de Cedro y de Andiroba; los cuales presentaron un rendimiento de 20.24% y de 6.1%, respectivamente, por lo que a partir de la metodología aplicada, tipo de solvente de extracción y tipo de planta será el porcentaje de rendimiento obtenido.

La espectroscopia FTIR, es utilizada ampliamente en la investigación de plantas medicinales y en la industria farmacéutica para la identificación rápida y cuantificación de los principios activos presentes en los extractos de plantas utilizados en medicina tradicional. Se ha reportado que en toda la planta de *Brugmansia arborea* se pueden encontrar diferentes metabolitos secundarios, principalmente alcaloides tropánicos. En la Figura 1, se muestra el espectro FTIR del extracto etanólico de *Brugmansia arborea* las vibraciones de estiramiento del grupo funcional O-H que proviene de alcoholes y ácidos orgánicos (Hadjiivanov *et al.*, 2020; Smith, 2011; Sun *et al.*, 2010; Liu *et al.*, 2013; Brangule *et al.*, 2020; Johnson *et al.*, 2020; Bensemmane *et al.*, 2021). Las bandas centradas en 2925 y 2855  $\text{cm}^{-1}$  son debidas a la vibración de estiramiento asimétrica y simétrica, respectivamente del  $\text{CH}_2$  de estructuras alifáticas. La banda centrada en 1595  $\text{cm}^{-1}$  es debida a las vibraciones de estiramiento de los enlaces  $\text{C}=\text{C}$  provenientes de estructuras aromáticas.

Se observa una banda centrada en 3280  $\text{cm}^{-1}$  que es

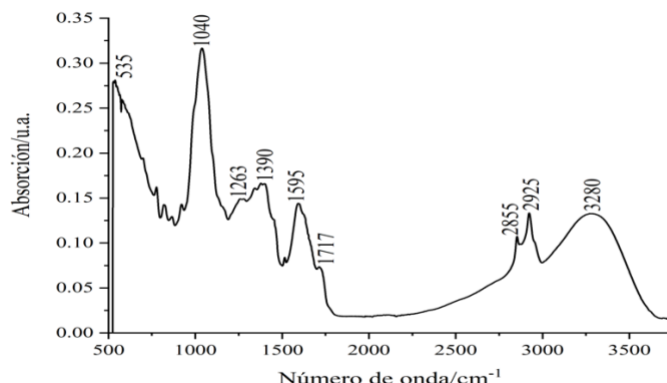
patients with poisoning, who were previously exposed to the plant and this generated anisocoria.

The pH of the extract was acidic (5.68), with a density of 0.8774 g/mL, which is less than the density of water (1 g/mL). The percentage yield was obtained from equation 1, recording 63.5% yield of the extract volume. As mentioned previously, some characteristics of the extracts are related to the type of plant and the extraction methodology, Pesewu *et al.* (2008) reported that the yields for alcoholic extracts of the oregano plant are between 3.2 and 16%; Metoui *et al.* (2015) reported yields for alcoholic extracts of *Citrus aurantium L.* of 18.3%; González (2004) documented the performance of ethanolic extracts of Cedro and Andiroba; which presented a yield of 20.24% and 6.1%, respectively, so based on the methodology applied, type of extraction solvent and type of plant, the percentage of yield obtained will be.

FTIR spectroscopy is widely used in medicinal plant research and in the pharmaceutical industry for the rapid identification and quantification of the active ingredients present in plant extracts used in traditional medicine. It has been reported that different secondary metabolites can be found throughout the *Brugmansia arborea* plant, mainly tropane alkaloids. Figure 1 shows the FTIR spectrum of the ethanolic extract of *Brugmansia arborea*.

A band centered at 3280  $\text{cm}^{-1}$  is observed, which is due to the stretching vibrations of the O-H functional group that comes from alcohols and organic acids (Hadjiivanov *et al.*, 2020; Smith, 2011; Sun *et al.*, 2010; Liu *et al.*, 2020; Smith, 2011; Sun *et al.*, 2010; Liu *et al.*, 2013; Brangule *et al.*, 2020; Johnson *et al.*, 2020; Bensemmane *et al.*, 2021). The bands centered at 2925 and 2855  $\text{cm}^{-1}$  are due to the asymmetric and symmetric stretching vibration, respectively, of  $\text{CH}_2$  of aliphatic structures. The band centered at 1595  $\text{cm}^{-1}$  is due to the stretching vibrations of the  $\text{C}=\text{C}$  bonds coming from aromatic structures. The band centered at 1040  $\text{cm}^{-1}$  is generated by the combination of the stretching vibrations of the  $=\text{C}-\text{O}-\text{C}$  and  $-\text{CH}_2\text{OH}$  functional groups coming from the various flavonoids present in the sample (Hadjiivanov *et al.*, 2020; Smith, 2011; Sun *et al.*, 2020; Smith, 2011; Sun *et al.*, 2010; Liu *et al.*, 2013; Brangule *et al.*, 2020; Johnson *et al.*, 2020; Bensemmane *et al.*, 2021, Krysa *et al.*, 2022).

Table 2 shows the assignment of the bands of the characteristic molecular vibrations of the ethanolic extract of *Brugmansia arborea*.



**Figura 1.** Espectro FTIR del extracto etanólico liofilizado de *Brugmansia arborea*.  
**Figure 1.** FTIR spectrum of the lyophilized ethanolic extract of *Brugmansia arborea*.

**Tabla 2.** Bandas FTIR de *Brugmansia arborea*.  
**Table 2.** FTIR bands of *Brugmansia arborea*.

Wave number (cm <sup>-1</sup> )	Asignación Assignment
3280	Stretching of the O-H group present in alcohols, phenols and carbohydrates.
2925	Symmetric stretching of CH <sub>2</sub> (hydrocarbons)
2855	CH <sub>2</sub> symmetrical stretching (hydrocarbons)
1717	Stretching vibration of C=O
1595	Stretching vibration of C=C bonds in structures aromatics.
1390	Bending of C-H bonds of alcohols and phenols
1263	Bending vibration of the C-N bonds
1040	Stretching vibration of the =C-O-C groups coming from the aromatic rings of flavonoids
535	Bending of the O=C-N bond

debido a las vibraciones de estiramiento del grupo funcional O-H que proviene de alcoholes y ácidos orgánicos (Hadjiivanov *et al.*, 2020; Smith, 2011; Sun *et al.*, 2010; Liu *et al.*, 2013; Brangule *et al.*, 2020; Johnson *et al.*, 2020; Bensemmane *et al.*, 2021). Las bandas centradas en 2925 y 2855 cm<sup>-1</sup> son debidas a la vibración de estiramiento asimétrica y simétrica, respectivamente del CH<sub>2</sub> de estructuras alifáticas. La banda centrada en 1595 cm<sup>-1</sup> es debida a las vibraciones de estiramiento de los enlaces C=C provenientes de estructuras aromáticas.

La banda centrada en 1040 cm<sup>-1</sup> es generada por la combinación de las vibraciones de estiramiento de los grupos funcionales =C-O-C y -CH<sub>2</sub>OH proveniente de los diversos

## CONCLUSIONS

The physical and organoleptic parameters of the ethanolic extract of *Brugmansia arborea* were obtained and using FTIR spectroscopy it was possible to identify various functional groups present in the extract, allowing them to be associated with the presence of flavonoids. Through FTIR spectroscopy it was confirmed that using ethanol as a solvent, the greatest amount of flavonoids present in *Brugmansia arborea* can be extracted, since, according to the FTIR spectrum, the vibrational mode associated with the =C-O-C functional groups from flavonoids is the most intense, which allows us to conclude that in the extract, this

flavonoides presentes en la muestra (Hadjiivanov *et al.*, 2020; Smith, 2011; Sun *et al.*, 2010; Liu *et al.*, 2013; Brangule *et al.*, 2020; Johnson *et al.*, 2020; Bensemmane *et al.*, 2021, Krysa *et al.*, 2022).

En la tabla 2, se muestra la asignación de las bandas de las vibraciones moleculares características del extracto etanólico de *Brugmansia arborea*.

## CONCLUSIONES

Se obtuvieron los parámetros físicos y organolépticos del extracto etanólico de *Brugmansia arborea* y utilizando espectroscopia FTIR se lograron identificar diversos grupos funcionales presentes en el extracto, permitiendo asociarlos a la presencia de flavonoides. Por medio de la espectroscopia FTIR se corroboró que utilizando etanol como disolvente se pueden extraer la mayor cantidad de flavonoides presentes en la *Brugmansia arborea*, ya que, de acuerdo al espectro FTIR, el modo vibracional asociada a los grupos funcionales =C-O-C proveniente de flavonoides es la más intensa, lo que permite concluir que, en el extracto, este grupo funcional es el de mayor abundancia.

## AGRADECIMIENTOS

A la Unidad Académica de Física-UAZ, por el acceso al equipo de espectroscopia

## REFERENCIAS

- Algradi, A. M., Liu, Y., Yang, B. Y., & Kuang, H. X. (2021). Review on the genus *Brugmansia*: Traditional usage, phytochemistry, pharmacology, and toxicity. *Journal of ethnopharmacology*, 279, 113910. <https://doi.org/10.1016/j.jep.2021.113910>
- Benítez-Benítez, R., Sarria-Villa, R. A., Gallo-Corredor, J. A., Pérez Pacheco, N. O., Álvarez Sandoval, J. H., & Giraldo Aristizabal, C. I. (2020). Obtención y rendimiento del extracto etanólico de dos plantas medicinales. *Revista Facultad De Ciencias Básicas*, 15(1), 31–40. <https://doi.org/10.18359/rfcb.3597>
- Bensemmane, N., Bouzidi, N., Daghbouche, Y., Garrigues, S., de la Guardia, M., & El Hattab, M. (2021). Quantification of phenolic acids by partial least squares Fourier-transform infrared (PLS-FTIR) in extracts of medicinal plants. *Phytochemical analysis: PCA*, 32(2), 206–221. <https://doi.org/10.1002/pca.2974>
- Brangule, A., Šukele, R., & Bandere, D. (2020). Herbal Medicine Characterization Perspectives Using Advanced FTIR Sample Techniques - Diffuse Reflectance (DRIFT) and Photoacoustic Spectroscopy (PAS). *Frontiers in plant science*, 11, 356. <https://doi.org/10.3389/fpls.2020.00356>

functional group is the most abundant.

## ACKNOWLEDGMENTS

To the Academic Unit of Physics-UAZ, for access to the FTIR spectroscopy equipment.

- Doan, U. V., Wu, M. L., Phua, D. H., Mendez Rojas, B., & Yang, C. C. (2019). *Datura* and *Brugmansia* plants related antimuscarinic toxicity: an analysis of poisoning cases reported to the Taiwan poison control center. *Clinical toxicology (Philadelphia, Pa.)*, 57(4), 246–253. <https://doi.org/10.1080/15563650.2018.1513527>
- Geller, F., Murillo, R., Steinhauser, L., Heinzmann, B., Albert, K., Merfort, I., & Laufer, S. (2014). Four new flavonol glycosides from the leaves of *Brugmansia suaveolens*. *Molecules (Basel, Switzerland)*, 19(5), 6727–6736. <https://doi.org/10.3390/molecules19056727>
- González-Villa, A. (2004). Obtención de Aceites Esenciales y Extractos Etanolicos de las Plantas del Amazonas. Universidad Nacional sede Bogotá. 1-100. [http://www.bdigital.unal.edu.co/1173/1/angelaandrea\\_gonzalezvilla.2004.pdf](http://www.bdigital.unal.edu.co/1173/1/angelaandrea_gonzalezvilla.2004.pdf)
- Guiche, Ridouane E., Tahrouch, S., Amri, O., El Mehrach, K., & Hatimie, A. (2015). Antioxidant activity and total phenolic and flavonoid contents of 30 medicinal and aromatic plants located in the South of Morocco. *International Journal of New Technology and Research*, 1(3), 263695

- Hadjiivanov, K. I., Panayotov, D. A., Mihaylov, M. Y., Ivanova, E. Z., Chakarova, K. K., Andonova, S. M., & Drenchev, N. L. (2021). Power of Infrared and Raman Spectroscopies to Characterize Metal-Organic Frameworks and Investigate Their Interaction with Guest Molecules. *Chemical reviews*, 121(3), 1286–1424. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.0c00487>
- Johnson, J., Mani, J., Ashwath, N., & Naiker, M. (2020). Potential for Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy toward predicting antioxidant and phenolic contents in powdered plant matrices. *Spectrochimica acta. Part A, Molecular and biomolecular spectroscopy*, 233, 118228. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2020.118228>
- Kim, H.G., Ko, J.H., Oh, H.J., Song, H.S., Kwon, J.H., Lee, Y.G., Lee, D.Y., Kang, S.C., Baek, N.I., 2018. New cytotoxic benzonitrile glycosides from brugmansia arborea flowers. *Bull. Kor. Chem. Soc.* 39, 687–690. <https://doi.org/10.1002/bkcs.11451>.
- Kim, H.G., Jang, D., Jung, Y.S., Oh, H.J., Oh, S.M., Lee, Y.G., Kang, S.C., Kim, D.O., Lee, D.Y., Baek, N.I., 2020. Anti-inflammatory effect of flavonoids from brugmansia arborea L. Flowers. *J. Microbiol. Biotechnol.* 30, 163–171. <https://doi.org/10.4014/jmp.1907.07058>.
- Krysa, M., Szymańska-Chargot, M., & Zdunek, A. (2022). FT-IR and FT-Raman fingerprints of flavonoids - A review. *Food chemistry*, 393, 133430. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2022.133430>
- Liu Y. (2013). Recent Progress in Fourier Transform Infrared (FTIR) Spectroscopy Study of Compositional, Structural and Physical Attributes of Developmental Cotton Fibers. *Materials (Basel, Switzerland)*, 6(1), 299–313. <https://doi.org/10.3390/ma6010299>
- Mattioli, L., Bracci, A., Titomanlio, F., Perfumi, M., & De Feo, V. (2012). Effects of *Brugmansia arborea* Extract and Its Secondary Metabolites on Morphine Tolerance and Dependence in Mice. *Evidence-based complementary and alternative medicine : eCAM*, 2012, 741925. <https://doi.org/10.1155/2012/741925>
- Metoui n, Gargouri S, Amri I, Fezzani T, Jamoussi B, Hamrouni L. (2015). Activity antifungal of the essential oils; aqueous and ethanol extracts from *Citrus aurantium L.* *Natural Product Research.* 29(23):2238-2241. <https://doi:10.1080/14786419.2015.1007136>
- Nencini, C., Cavallo, F., Bruni, G., Capasso, A., De Feo, V., De Martino, L., Giorgi, G., & Micheli, L. (2006). Affinity of Iresine herbstii and *Brugmansia arborea* extracts on different cerebral receptors. *Journal of ethnopharmacology*, 105(3), 352–357. <https://doi.org/10.1016/j.jep.2005.11.022>
- Pérez B. E, Rodríguez O. R y Sánchez V. M. C. (2012). Plantas tóxicas: Neurotoxicidad por floripondio. *Archivos de medicina de Urgencia de Mexico.* 4(3):119-124
- Pesewu, G. A., Cutler, R. R., & Humber, D. P. (2008). Antibacterial activity of plants used in traditional medicines of Ghana with particular reference to MRSA. *Journal of ethnopharmacology*, 116(1), 102–111. <https://doi.org/10.1016/j.jep.2007.11.005>
- Renner, U. D., Oertel, R., & Kirch, W. (2005). Pharmacokinetics and pharmacodynamics in clinical use of scopolamine. *Therapeutic drug monitoring*, 27(5), 655–665. <https://doi.org/10.1097/01.ftd.0000168293.48226.57>
- Sen, T., y Samanta, S. K. (2015). Medicinal plants, human health and biodiversity: a broad review. *Advances in biochemical engineering/biotechnology*, 147, 59–110. [https://doi.org/10.1007/10\\_2014\\_273](https://doi.org/10.1007/10_2014_273)
- Sharma, A., Flores-Vallejo, R., Cardoso-Taketa, A. & Villarreal, M.L. (2017). Antibacterial activities of medicinal plants used in Mexican traditional medicine. *Journal of ethnopharmacology*, 208, pp. 264–329. <https://doi.org/10.1016/j.jep.2016.04.045>
- Sosa-López, Ángela Antonia, Cabrera, María Graciela, & Álvarez, Mayra Yanet. (2017). Parámetros físicos y características organolépticas de propóleos provenientes de la Provincia de Misiones, Argentina. *Journal of the Selva Andina Biosphere*, 5(1), 51-58.
- Smith, B. C. (2011). *Fundamentals of Fourier transform infrared spectroscopy*. CRC press.
- Sun, S., Chen, J., Zhou, Q., Lu, G., & Chan, K. (2010). Application of mid-infrared spectroscopy in the quality control of traditional Chinese medicines. *Planta medica*, 76(17), 1987–1996. <https://doi.org/10.1055/s-0030-1250520>
- Vokou, D., Kokkini, S., Bessiere, J.M. (1993). Geographic variation of Greek oregano (*Origanum vulgare ssp. hirtum*) essential oils. *Biochemical Systematics and Ecology.* 21: 287-295. [https://doi:10.1016/0305-1978\(93\)90047-U](https://doi:10.1016/0305-1978(93)90047-U)