

Química

Uso de redes moleculares para anotações de compostos da espécie *Merremia umbellata*

Paulo Henrique Avelar de Oliveira - 9º módulo de Engenharia Química, UFLA, Bolsista PIBIC/CNPq

Barbara Sayuri Belleto - Orientadora DQI, UFLA. - Orientador(a)

Resumo

Os produtos naturais são uma fonte importante para a descoberta de moléculas orgânicas com propriedades bioativas. A *Merremia umbellata*, pertencente à família Convolvulacea, é uma rica fonte de compostos bioativos que apresentam diferentes usos tradicionais. Como atividades biológicas podemos destacar atividades antioxidante, inseticida, antifúngico, antibacteriano, citotoxicidade de células cancerígenas, antidiabético, cicatrizante, entre outras. Apesar do gênero ser descrito na literatura com cerca de 100 espécies, há poucos estudos sobre a espécie do presente trabalho. Modernas técnicas analíticas como a Cromatografia Líquida de Alta Eficiência (CLAE) acoplada à Espectrometria de Massas (EM) são importantes para a análise de metabólitos presentes em misturas complexas. Para facilitar o processamento da enorme quantidade de dados gerados por essas técnicas utilizou-se a plataforma GNPS (do inglês Global Natural Products Social Molecular Networking), que permite a identificação de substâncias conhecidas (desreplacação), agrupando espectros baseados em similaridades espectrais. O objetivo desse projeto foi investigar o perfil químico de *M. umbellata* utilizando tal plataforma. Os extratos de *M. umbellata* foram preparados utilizando como solvente metanol:água na proporção 1:1. As análises de CLAE-EM/EM foram realizadas utilizando um cromatógrafo Agilent 1290 infinity II (Agilent technologies) acoplado a um espectrômetro de Massas de Alta Resolução ESI-qTOF (Bruker Daltonics). O experimento de Molecular Networking da plataforma permitiu a anotação de 23 metabólitos no total. A ferramenta MolNetEnhancer organizou os metabólitos do extrato no modo positivo de ionização em 6 principais famílias moleculares, destacando-se os prenol lipídeos, Benzenos e derivados, compostos organo-oxigenados, ácidos carboxílicos e derivados e ácidos graxos. Já para o extrato no modo negativo de ionização, os metabólitos foram organizados em 3 famílias moleculares, destacando-se os prenol lipídeos, compostos organo-oxigenados, ácidos carboxílicos e derivados. As ferramentas do GNPS utilizadas mostraram-se capazes de identificar moléculas, agrupar os metabólitos em diferentes funções orgânicas, processar diversos espectros simultaneamente otimizando o tempo de análise, permitindo assim um melhor conhecimento da composição química da planta estudada. Agradecimentos ao Laboratório de Pesquisa em Química de Produtos Naturais - Central Analítica da UFMT.

Palavras-Chave: *Merremia umbellata*, GNPS, metaboloma.

Instituição de Fomento: UFLA, CAPES, CNPq, Central Analítica da UFMT.

Link do pitch: https://youtu.be/rMqfyBmrs_k