

Engenharia Química

Uso da plataforma GNPS na identificação do metaboloma de *Combretum lanceolatum*

Karolayne da Silva Santos - 5º módulo de Engenharia Química

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 *Combretum lanceolatum*, popularmente conhecida como Pombeiro Vermelho, é uma planta pertencente à família Combretaceae, usada na medicina popular no auxílio à digestão. Estudos fitoquímicos relacionados a plantas deste gênero relatam o isolamento de flavonoides, taninos e triterpenos, entre outras, e muitos destes compostos são relatados apresentando um amplo espectro de atividades biológicas. 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 surgiu em 2016 a plataforma GNPS (do inglês Global Natural Products Social Molecular Networking), que permite a identificação de substâncias conhecidas (desrepliação), agrupando espectros baseados em similaridades espectrais. O objetivo desse projeto foi investigar o perfil químico de *C. lanceolatum* utilizando o GNPS. Os extratos da raiz e folhas de *C. lanceolatum* 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). Todos os dados gerados foram processados através da plataforma GNPS. O experimento de Molecular Networking da plataforma permitiu a anotação de 48 metabólitos nas folhas e 20 metabólitos nas raízes. A ferramenta MolNetEnhancer da mesma plataforma organizou os metabólitos do extrato das folhas em 31 famílias moleculares, destacando-se os glicerofosfolipídeos, prenol lipídeos e ácidos carboxílicos e derivados. Já para o extrato das raízes, os metabólitos foram organizados em 25 famílias moleculares, destacando-se os prenol lipídeos, benzenoides, cumarinas, e esteroides 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 Programa de Bolsas Institucionais da UFLA e ao Laboratório de Pesquisa em Química de Produtos Naturais-Central Analítica da UFMT.

Palavras-Chave: *Combretum lanceolatum*, GNPS, metaboloma.

Instituição de Fomento: Universidade Federal de Lavras

Link do pitch: https://youtu.be/ypXPcL_DO2c