

Análise abrangente do perfil lipídico de grãos verdes de café arábica (*Coffea arabica* L.) por CL-EMAR e quimioinformática

Ana Carolina R. Silva^{1,2}(PG), Carol C. Silva¹ (IC), Rafael Garrett¹ (PQ)*, Claudia M. Rezende² (PQ)

*rafael_garrett@iq.ufrj.br

¹Laboratório de Metabolômica, Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro - Avenida Horácio Macedo, 1281, Cidade Universitária, Rio de Janeiro, RJ, Brasil

²Laboratório de Análise de Aromas, Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro - Avenida Athos da Silveira Ramos, 149, Cidade Universitária, Rio de Janeiro, RJ, Brasil

Palavras Chave: lipídios, café, CL-EMAR

Introdução

Os lipídios compõem, aproximadamente, 17% da composição química dos grãos verdes de café arábica. Eles participam de diversos processos biológicos como sinalizadores químicos, reserva energética e no café já foram descritos como marcadores para diferenciar variedades de uma mesma espécie e a origem geográfica¹. Apresentam uma diversidade enorme de estruturas químicas/polaridades e quantidade em diferentes matrizes. No café, os triacilgliceróis são os lipídios mais abundantes, enquanto os fosfolipídios são encontrados em menor quantidade². Logo, devido à sua complexidade, é essencial o uso de técnicas abrangentes e de alta sensibilidade para análise da fração lipídica do café. Além disso, a escolha do método de extração tem grande impacto na recuperação dos lipídios extraídos. Assim, o objetivo deste trabalho foi explorar diferentes métodos de extração e o uso de CL-EMAR combinados com bases de dados de fragmentação de massa *in silico* para uma análise abrangente do perfil lipídico de grãos verde café arábica.

Resultados e Discussão

Para este estudo, dois procedimentos clássicos para extração de lipídios (Bligh-Dyer e Folch)^{3,4} e um recentemente descrito (Matyash)⁵, que usa o tert-metil-butil éter (MTBE) em vez de clorofórmio (CHCl₃) como solvente de extração, foram utilizados para extrair os grãos verdes moídos de café. A análise do perfil lipídico foi realizada por cromatografia líquida acoplada a espectrometria de massas alta resolução (CL-EMAR, modelo Thermo QExacte Plus) equipada com uma fonte de ionização por *electrospray* operando nos modos positivo e negativo e uma Coluna CSH C-18 da Waters. O processamento de dados e a identificação lipídica foram realizados por meio do fluxo de trabalho de lipidômica no software MS-DIAL contendo a biblioteca LipidBlast MS/MS. Além disso, um banco de dados de lipídios já descritos em café foi construído para aumentar a confiabilidade das identificações. A identificação dos compostos foi realizada comparando os perfis de fragmentação descritos na literatura para cada classe de lipídio com

os das amostras. Por exemplo, para identificar fosfocolinas (FCs), foram utilizados o íon molecular [M+Na]⁺ e os fragmentos [M+Na-183]⁺ (perda da fosfocolina) e [M+Na-RxCOOH]⁺ (perda dos ácidos graxos), montando assim a estrutura química de cada substância. Desta forma, as subclasses triacilgliceróis, diacilgliceróis, fosfocolinas e lisofosfocolinas foram identificadas no modo positivo e fosfoinositol, lisofosfoinositol e ácido fosfatídico no modo negativo de ionização. Mais de 120 compostos foram identificados nos extratos de café, sendo o método de Matyash o mais eficiente na recuperação dos lipídios identificados. Além disso, pelo fato de o MTBE possuir densidade menor do que a água, a coleta da fração orgânica contendo os lipídios é mais fácil e menos sujeita a erros, aumentando a reprodutibilidade dos resultados^{5,6}. Com relação à caracterização química, pode-se considerar que o método de análise empregado foi abrangente, já que possibilitou a identificação de diferentes classes de substâncias presentes na fração lipídica do café por métodos de extração e análises rápidas e reprodutíveis.

Conclusões

A extração de lipídios segundo Mataysh foi a mais eficiente para o estudo do perfil lipídico dos grãos de café, apresentando maior número de compostos extraídos comparado aos outros dois métodos testados e com a vantagem de poder recuperar os lipídios na fase superior da extração bifásica. Utilizando a abordagem da lipidômica por CL-EMAR mais de 120 compostos foram identificados, compreendendo diferentes subclasses lipídicas, incluindo as espécies moleculares de fosfolipídeos que foram descritas pela primeira vez em grãos crus de café arábica.

Agradecimentos

Ladetec/IQ-UFRJ, Capes (Financial code 001), CNPq, Faperj, Embrapa Café.

¹AMORIM, A.C.L et al. *J. Braz. Chem. Soc.* **2009**, 20, 313.

²SPEER, K. KÖLLING-SPEER, I. *Braz. J. Plant Physiol.* **2006**, 18, 201

³BLIGH, E.G. DYER, W. J. *Can J Biochem Physiol.* **1959**, 37, 911.

⁴FOLCH, J. et al. *J. Biol. Chem.* **1957**, 1, 497.

⁵MATYASH, V. et al. *J. Lipid Res.* **2008**, 49, 1137, 2008.

⁶ULMER, C. Z. et al. *Anal. Chim. Acta.* **2018**, 1037, 351.