

# Visualização do perfil metabólico de exsiccatas de *Solanum* (Solanaceae) de herbário

**João Victor Mendes Resende (PG)<sup>1</sup>, Najla M. D de Sá (PG)<sup>2</sup>, Rafael Garrett (PQ)<sup>2</sup>, Marcelo Trovó Lopes de Oliveira (PQ)<sup>3</sup>, Rosana Conrado Lopes (PQ)<sup>3</sup>, Ricardo Moreira Borges (PQ)<sup>1\*</sup>**

<sup>1</sup> Instituto Walter Mors de Pesquisa em Produtos Naturais (IPPN), Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ), Rio de Janeiro, Brasil

<sup>2</sup> Instituto de Química (IQ), Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ), Rio de Janeiro, Brasil

<sup>3</sup> Instituto de Biologia (IB), Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ), Rio de Janeiro, Brasil

\*Email ricardo\_mborges@yahoo.com.br

*Palavras Chave:* Banco de dados, Desrepliação, Espectrometria de Massas, Solanaceae, *Solanum*

## Introdução

Herbários, tal como concebidos há centenas de anos, são coleções de material botânico mantidos para pesquisas em áreas diversas que envolvam vegetais. Plantas secas em estufa e prensadas para manter suas características morfológicas intactas são catalogadas e armazenadas sistematicamente, representando uma fonte substancial de material representativo da biodiversidade. Em vista disso, é surpreendente que pouquíssimos estudos envolvendo fitoquímica façam uso dessas amostras. O gênero *Solanum*, com mais de 1500 espécies, é o mais representativo da família Solanaceae. Esse gênero já foi extensamente estudado, existindo uma série de dados na literatura sobre os metabólitos encontrados nele. Como esperado, diferentes atividades biológicas foram estudadas para seus constituintes químicos e estes podem ser exploradas no desenvolvimento de novos fármacos. Desrepliação trata de uma abordagem que permite identificar substâncias presentes em uma mistura sem a necessidade de isolá-las. Ela permite, portanto, uma economia em tempo e custos logo que previne a obtenção de substâncias e dados já conhecidos. A principal ferramenta analítica usada em estudos que envolvem desrepliação é a CL-ESI-EM devido à sensibilidade, seletividade e capacidade de identificação de substâncias com uso de bancos de dados já adquiridos.

O objetivo deste estudo foi avaliar o uso de amostras do herbário quanto a ocorrência de metabólitos secundários (MS) de interesse usando o gênero *Solanum* L. (Solanaceae). Para tanto, foi feito um procedimento de desrepliação usando extratos em metanol-água (8:2, v/v) e CL-ESI-EM como ferramenta analítica.

## Resultados e Discussão

Após pré-processamento com o MZMine<sup>1</sup> e visualização das redes moleculares calculadas com o GNPS, foram identificadas 185 substâncias apenas por sua base de dados<sup>2</sup>. Dentre elas, compostos fenólicos, aminoácidos e ácidos graxos. Uma vez que foi mostrada a possibilidade de identificar MS nos extratos de amostras do herbário,

decidiu-se analisar a possibilidade de utilizar os mesmos dados para a discriminação entre diferentes espécies de plantas utilizando análise multivariada. Os dados de *S. pseudoquina* e *S. argenteum* foram processados em separado e submetidos às análises de PCA e PLS-DA.<sup>3</sup>

Existe uma tendência de distinção entre as duas espécies. Ao utilizar 3 componentes, a análise de PLS-DA mostrou  $r^2 = 0.999$  e  $q^2 = 0.555$  sugerindo que o modelo é preditivo. Os dados das duas espécies também foram submetidos para um cálculo das redes moleculares para identificação daquelas substâncias indicadas como marcadores taxonômicos pelo *VIP scores* (do inglês *Variable Importance in Projection*). Em três clusters encontraram-se os 15 candidatos selecionados (*VIP score* > 2), sendo eles flavonoides glicosilados e glicoalcaloides; estes últimos são marcadores conhecidos para o gênero.

## Conclusões

O presente estudo mostrou a possibilidade de trabalhar com amostras de herbário para identificação de MS de interesse. Apesar dos anos de armazenamento (mais de 50 anos em alguns casos) e das condições de secagem em estufa, muitos metabólitos ainda parecem ser mantidos intactos. Ainda, os resultados indicam dados de CL-ESI-EM são promissores e levantam a possibilidade de se incluir dados analíticos a estudos taxonômicos de fato. Entretanto, há a necessidade de um número maior de replicatas para maior poder estatístico do agrupamento e da classificação das espécies.

## Agradecimentos

Agradecemos ao Instituto de Biologia da UFRJ pela cessão das amostras do herbário e ao PIBIC-CAPES pelo financiamento da pesquisa.

1: T. Pluskal, S. Castillo, A. Villar-Briones, M. Orešič, MZmine 2: Modular framework for processing, visualizing, and analyzing mass spectrometry-based molecular profile data, BMC Bioinformatics 11:395 (2010). PMID: 20650010

2: Wang, Mingxun, et al. "Sharing and community curation of mass spectrometry data with Global Natural Products Social Molecular Networking." Nature Biotechnology. 34.8 (2016): 828-837

3: Chong, J., et al. "MetaboAnalyst 4.0: towards more transparent and integrative metabolomics analysis". Nucleic Acids Research. 46 (2018): 486-494.