

Como não perder seus marcadores em estudos metabolômicas

Jan Schripsema^{*1} (PQ), **Ronald dos Santos Merlim**¹ (PG), **Laís Gonçalves Parvan** (PG)¹, **Denise Saraiva Dagnino**² (PQ).

¹Grupo Metabolômica – Laboratório de Ciências Químicas, CCT, Universidade Estadual do Norte Fluminense, Av. Alberto Lamego, nº 2000 – Campos dos Goytacazes, RJ; ²Grupo Metabolômica – Laboratório de Biotecnologia, CBB, Universidade Estadual do Norte Fluminense, Av. Alberto Lamego, nº 2000 – Campos dos Goytacazes, RJ

*jan.schripsema@gmail.com ou jan@uenf.br

Palavras Chave: Metabolômica, Similaridade, Espectroscopia diferencial, Análise Multivariada de Dados, Análise Hierárquica de Cluster.

Introdução

Metabolômica é o campo de pesquisa que está se empenhando para obter “fingerprints” metabólicas completas, detectar diferenças entre elas e providenciar hipóteses para explicar as diferenças.¹ As diferenças são muitas vezes os marcadores. Por exemplo óleos vegetais podem ser caracterizados por compostos específicos, por exemplo lignanas em óleo de gergelim² ou ácidos graxos ciclopropanoicos em óleo de baobá.³ Estes compostos estão presentes em quantidades mínimas (mg/g) e eles são negligenciados com as metodologias normalmente usados em metabolômica, geralmente envolvendo análise multivariada de dados, como por exemplo a análise de componentes principais (ACP). Neste estudo mostramos como os recentes introduzidos métodos de cálculo de similaridade e espectroscopia diferencial² podem ser usados para não perder as informações dos compostos minoritários.

Resultados e Discussão

A similaridade entre espectros de Ressonância Magnética Nuclear foi calculado depois o alinhamento dos espectros e a aplicação de um alargamento (chamado “floating bins”)². A comparação das similaridades calculadas e os resultados de ACP mostram que as similaridades são mais confiáveis para avaliar diferenças entre espectros que uma figura de ACP porque em ACP há múltiplas dimensões que não podem ser mostrados em gráficos bidimensionais. Mesmo assim, tanto a similaridade como ACP não mostram diferenças significantes para compostos minoritários. Com espectroscopia diferencial eles ficam bem visualizados. A posterior análise quantitativa destes compostos mostra se eles podem ser usados como marcadores.

O procedimento foi analisado para a análise de óleos vegetais, óleos essenciais de vetiver e também para a análise de remédios (comprimidos de paracetamol).

Foi possível de distinguir quinze diferentes tipos de óleo vegetal especialmente usando sinais de compostos minoritários.^{2,3} A análise de amostras de óleo de vetiver mostrou que muitos são adulterados⁴ e foi possível de distinguir óleos de diferentes origens. A análise de comprimidos de paracetamol⁵ mostrou que 15 componentes entre adjuvantes e impurezas podem ser analisados com quantidades até menor de que 0,1 mg por comprimido. Estes dados são importantes para determinar a origem da matéria prima e/ou o local de fabricação.

Conclusões

Para classificação de amostras todos os componentes podem ter importância. Assim os melhores resultados em Análise Hierárquica de Cluster foram obtidos quando também os compostos minoritários são levadas em consideração e são quantificadas e na análise final um peso igual e dada para os diferentes componentes.

Agradecimentos

FAPERJ, CAPES e CNPq.

¹ Schripsema, J. e Dagnino, D.S. in : *Handbook of Chemical and Biological Plant Analytical Methods*, Hostettmann, Marston, Stuppner and Chen, Springer Verlag, 2013

² Schripsema, J. *Metabolomics*, 2019, 15, 39.

³ Augustyn, W., Viljoen, A. e Schripsema, J. *J. Food Comp. Anal.*, 2021, 102, 104000.

⁴ Schripsema, J., da Silva, S.M. e Dagnino, D. *Talanta*, 2022, 237, 122928.

⁵ Schripsema, J., Merlim, R.D., Parvan, L.G., Ribeiro, H.S.D., Schripsema, L.D., Aleixo, S., Becht, A., Holzgrabe, U. e Dagnino, D. *J. Pharm. Biomed. Anal.*, 2022, 215, 114773.