

Análise da composição química de cinco espécies de *Eugenia* (Myrtaceae) usando ferramentas espectrométricas e quimiométricas

Elizanne P. S. Justo (IC)*, Felipe M. A. Silva (PG),
Afonso D. L. Souza (PQ), José Cardoso-Neto (PQ), Marcos Batista Machado (PQ)

*elizanneporto@gmail.com

Universidade Federal do Amazonas – UFAM, Instituto de Ciências Exatas – ICE

Palavras Chave: *Eugenia*, Espectrometria de Massas, Quimiometria.

Introdução

Os estudos químicos de *Eugenia* spp. revelam uma composição rica em flavonoides, fenólicos glicosilados, antocianinas, mono/sesquiterpenos, triterpenos/esteroides e cumarinas.¹ Esse gênero é um dos maiores da família Myrtaceae com cerca de 400 espécies no Brasil.² Na Reserva Florestal Adolpho Ducke (RFAD) em Manaus-AM, uma amostra representativa da floresta Amazônica de terra-firma, foram identificados 28 espécies de *Eugenia*.² Este estudo visa construir um modelo de similaridade química entre as espécies *Eugenia citrifolia*, *E. ochrophloea*, *E. protenta*, *E. ferreiraeana* e *E. pallidopunctata*, empregando espectrometria de massas e ferramentas quimiométricas/estatísticas. Em trabalhos anteriores, o estudo químico a partir dos extratos etanólicos das folhas de *E. ochrophloea* resultou no isolamento e na determinação estrutural do óxido β -cariofileno e do β -sitosterol+estigmasterol.³ A partir dos óleos essenciais de *E. protenta*, identificou-se dimetilxantoxilina, selin-11-en-4 α -ol, β -elemeno, germacreno D, biciclogermacreno e δ -candineno como constituintes majoritários.⁴ A abordagem adotada neste trabalho apresenta uma metodologia rápida, moderna, de baixo custo e reprodutível.

Resultados e Discussão

Foram coletadas folhas pertencentes a dois indivíduos de *E. protenta*, *E. ferreiraeana* e *E. pallidopunctata*, e de um indivíduo de *E. citrifolia* e *E. ochrophloea* ocorrentes na RFAD. Os materiais vegetais foram secos e moídos. As amostras foram submetidas à extração em triplicata com etanol, acetona e água em diferentes proporções, empregando o método do triângulo de seletividade proposto por Snyder e Kirkland (1979).⁵ As soluções diluídas dos extratos foram injetadas no espectrômetro de massas. Os dados obtidos foram exportados para os softwares The Unscrambler™ 10.2 e Minitab™ 13.0. A Análise das Componentes Principais (PCA) das intensidades relativas médias obtidas partir dos espectros de massas (modo negativo) de *Eugenia* spp. evidenciou distinção entre os extratos aquosos dos não aquosos. A PCA dos extratos não aquosos para as cinco espécies de *Eugenia* mostrou a formação de dois grupos distintos. O primeiro formado pela espécie *E. ferreiraeana*, e o segundo pelas demais espécies. A partir do gráfico de “loadings” da PC1 identificou-se

os íons majoritários de m/z [M-H]⁻ 297 e 595, responsáveis pela separação da espécie *E. ferreiraeana*. A análise espectral desses íons com os dados descritos na literatura sugere a existência de uma flavanona metoxilada/metilada (5 ou 7-metoxidesmetoximateucinol)⁶ e um flavonol diglicosilado [myricetina-3-O- β -xylopyranosil-(1 \rightarrow 2)-O- α -raminopyranosideo].⁷ A PCA para as demais quatro espécies revelou a formação de três grupos. O primeiro formado por dois indivíduos de *E. pallidopunctata* (m/z [M-H]⁻ 457 e 785), o segundo formado pelos indivíduos de *E. protenta* (m/z [M-H]⁻ 191, 227, 253, 269 e 283) e o terceiro por *E. citrifolia* e *E. ochrophloea* (m/z [M-H]⁻ 483, 539, 635, 657 e 787). A análise desses íons com os descritos na literatura sugere a presença de estruturas flavonoídicas e terpenoídicas. A análise estatística paramétrica (Análise de Variância) ou não paramétrica (teste de Kruskal-Wallis) para os íons selecionados revelou diferenciação significativa para as intensidades relativas desses íons para os quatro grupos observados. A Análise Hierárquica de Cluster (HCA) corroborou a PCA, cujo dendograma mostra a formação de quatro grupos distintos pelos espécimes de *E. ferreiraeana*, *E. pallidopunctata*, *E. protenta* e *Eugenia citrifolia*+*E. ochrophloea*. Essa última espécie foi previamente descrita como *E. aff. citrifolia*, devido a sua similaridade anatômica e morfológica com *E. citrifolia*.³

Conclusões

O modelo de similaridade química entre as cinco espécies de *Eugenia* apresentado neste trabalho mostrou-se eficiente na separação por espécies e no agrupamento por indivíduos e espécies afins. Análises por EMAR estão sendo realizadas para confirmar a identidade dos íons responsáveis por este agrupamento.

Agradecimentos

Ao CNPq e à FAPEAM.

¹Magina, M. D. A. et al. *Química Nova*, v. 35, p. 1184-1188, 2012.

²Ribeiro, J. E. et al. Flora da reserva Ducke. Manaus: INPA-DFID. 1999.

³Justo, E. P. S. et al. 4th *Brazilian Conference on Natural Products*, 2013.

⁴Zoghbi, M.G.B. et al. *Biochemical systematic and ecology*, v. 39, p. 660-665, 2011.

⁵Snyder, L. R.; Kirkland, J. J. *Introduction to Modern Liquid Chromatography*. John Wiley & Sons INC. 1979, 863 p.

⁶Wu, W. et al. *Chinese Pharmaceutical Journal*, v. 57, p. 7-15, 2005.

⁷Slowing, K. et al. *Phytotherapy Research*, v. 10, p. S126-S127, 1996.