

# 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.<sup>1</sup> Esse gênero é um dos maiores da família Myrtaceae com cerca de 400 espécies no Brasil.<sup>2</sup> Na Reserva Florestal Adolpho Ducke (RFAD) em Manaus-AM, uma amostra representativa da floresta Amazônica de terra-firma, foram identificados 28 espécies de *Eugenia*.<sup>2</sup> 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  $\beta$ -cariofileno e do  $\beta$ -sitosterol+estigmasterol.<sup>3</sup> A partir dos óleos essenciais de *E. protenta*, identificou-se dimetilxantoxilina, selin-11-en-4 $\alpha$ -ol,  $\beta$ -elemeno, germacreno D, biciclogermacreno e  $\delta$ -candineno como constituintes majoritários.<sup>4</sup> 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).<sup>5</sup> As soluções diluídas dos extratos foram injetadas no espectrômetro de massas. Os dados obtidos foram exportados para os softwares The Unscrambler<sup>TM</sup> 10.2 e Minitab<sup>TM</sup> 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]<sup>-</sup> 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)<sup>6</sup> e um flavonol diglicosilado [myricetina-3-O- $\beta$ -xylopyranosil-(1 $\rightarrow$ 2)-O- $\alpha$ -raminopyranosideo].<sup>7</sup> 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]<sup>-</sup> 457 e 785), o segundo formado pelos indivíduos de *E. protenta* ( $m/z$  [M-H]<sup>-</sup> 191, 227, 253, 269 e 283) e o terceiro por *E. citrifolia* e *E. ochrophloea* ( $m/z$  [M-H]<sup>-</sup> 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*.<sup>3</sup>

## 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.

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

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

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

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

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

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

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