

Construção de um banco de espectros de absorção no UV para uso com CLAE: uma ferramenta útil para a identificação rápida de metabólitos secundários de microorganismos.

Diego Z. Gomes (IC)¹, Renata Pastre (IC)¹, Edson Rodrigues-Filho (PQ)¹, Andrey M. R. Marinho (PG)¹

diegoquimica@gmail.com; renata_pastre@yahoo.com.br; edinho@pesquisador.cnpq.br

1. Lab. de Espectrometria de Massas/Lab. de Bioquímica Micromolecular de Microorganismos – Departamento de Química – UFSCar - São Carlos

Palavras Chave: CLAE, banco de dados, UV-Visível.

Introdução

A análise de amostras desconhecidas por CLAE utilizando como detector o UV-Visível é uma prática bastante comum, uma vez que moléculas, as quais possuem grupos cromóforos, apresentam bandas características nos espectros de absorção na região de detecção. Assim, baseado nos seus respectivos espectros de absorção nessa região, bem como no seu tempo de retenção, que é característico de cada substância, procedemos a construção de uma base de dados para CLAE com o intuito de se promover a identificação de amostras desconhecidas por comparação com padrões previamente analisados e armazenados nessa biblioteca. Essa ferramenta permite que o CLAE seja utilizado, não somente como um método de separação, mas também como técnica de caracterização de várias classes de substâncias, principalmente as derivadas de microorganismos como policetídeos, alcalóides e esteróides.

Resultados e Discussão

Os padrões utilizados na construção da base de dados foram obtidos de diversas espécies de fungos isolados a partir de tecidos saudáveis das plantas hospedeiras *Murraya paniculata* (Rutaceae) e *Melia azedarach* (Meliaceae). Todas as substâncias tiveram suas estruturas elucidadas através de técnicas espectroscópicas como RMN e EM, para serem empregadas, então, como padrões. Essas substâncias foram dissolvidas em acetonitrila e analisadas por CLAE, utilizando eluição gradiente de acetonitrila/água, em coluna ODS Synergi Phenomenex. O método de análise estabelecido vai de 40 a 100% de ACN em 50 minutos, com intervalo de 15 minutos entre cada injeção para estabilização da coluna com 30% ACN. Os dados foram adquiridos em um equipamento da Shimadzu equipado com detector tipo DAD, usando o programa CLASS-VP (V. 6.14 SP2). Para detecção fez-se uma varredura de 200 a 800 nm, com amostragens de 0.64 segs. Os espectros de aproximadamente 40 compostos (exemplos na

Figura 1) foram armazenados juntamente com dados cromatográficos e podem ser automaticamente comparados com amostras desconhecidas.

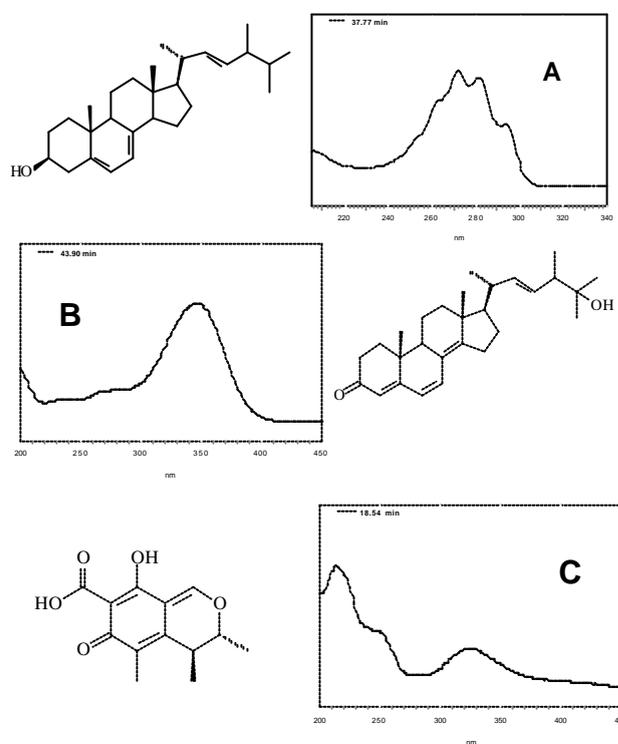


Figura 1. Espectros no UV dos padrões ergosterol, (A), esteróide-2A, (B) e citrinina, (C).

Conclusões

A base de dados implementada contém informações espectrais capazes de diferenciar rapidamente classes de metabólitos secundários como os esteróides e policetídeos mostrados acima. Isso tem facilitado as análises de inúmeros extratos fúngicos.

Agradecimentos

Agradecemos aos órgãos financiadores CNPq, FAPESP e CAPES.