

Diterpenos, ressonância magnética nuclear de carbono-13 e redes neurais utilizados no estudo quimiotaxonômico de Annonaceae.

Emanuela Falcão¹ (IC), Taissa Régis¹ (IC), Clemir C. de Oliveira¹ (IC), Josean Fachine Tavares² (PQ), Marcelo S. da Silva² (PQ) Luciana Scotti³ (PQ), Marcus Tullius Scotti^{1*} (PQ),*mtscotti@cdae.ufpb.br

¹ Departamento de Engenharia e Meio Ambiente, UFPB- Campus IV; ² Laboratório de Tecnologia Farmacêutica, UFPB- Campus I; ³ Faculdade de Ciências Farmacêuticas, USP.

Palavras Chave: quimiotaxonomia, mapas auto-organizáveis, RMN ¹³C, Annonaceae.

Introdução

A família Annonaceae tem cerca de 3.300 espécies em 130 gêneros. As investigações de representantes desta família têm levado ao isolamento de uma variedade de substâncias de várias classes: alcalóides, flavonóides, esteróides e terpenos. Comparações de compostos de diferentes táxons podem fornecer resultados que contribuem para o entendimento de sua sistemática. Dados de Ressonância Magnética Nuclear de Carbono (RMN ¹³C) são uma fonte importante sobre informações de estruturas moleculares e utilizados para analisar suas diferenças/semelhanças.

O objetivo desse trabalho é contribuir para o estudo quimiosistemático da família Annonaceae, utilizando dados de ocorrência botânica e de RMN ¹³C de diterpenos e mapas auto-organizáveis (SOM – Self-Organizing Maps) para analisar as relações entre os gêneros *Annona*, *Polyalthia* e *Xylopi*a. Os resultados foram comparados com os obtidos em estudos encontrados na literatura¹.

Resultados e Discussão

Foram selecionados da literatura 121 totalizando 169 ocorrências². Os respectivos dados de RMN ¹³C foram dispostos em ordem da possível origem biogenética e foram associados aos gêneros da família Annonaceae (*Annona*, *Polyalthia* e *Xylopi*a) de onde foram isolados. Os dados foram utilizados para treinar Mapa Auto Organizáveis (SOMs – “Self-Organizing Maps”) que agrupam as ocorrências utilizando os dados de espectro de RMN ¹³C, as informações sobre os gêneros foram apenas utilizadas para rotular as regiões, sendo o SOM um método de análise não supervisionada.

Tabela 1. Resultados classificatórios dos gêneros *Annona*, *Polyalthia* e *Xylopi*a utilizando os dados de RMN ¹³C e SOM.

Gênero	Ocorrências	Nº de acertos	% de acerto
<i>Annona</i>	60	60	100,0
<i>Polyalthia</i>	43	43	100,0
<i>Xylopi</i> a	66	53	80,3
Total geral	169	156	92,3

Os dados obtidos foram comparados com estudos de filogenia prévios utilizando dados moleculares e morfológicos¹ (figura 2). A partir dos dados de RMN ¹³C obtidos das estruturas químicas dos diterpenos, o SOM obteve resultados significativos (>80% de acerto) para a diferenciação dos gêneros (tabela 1).

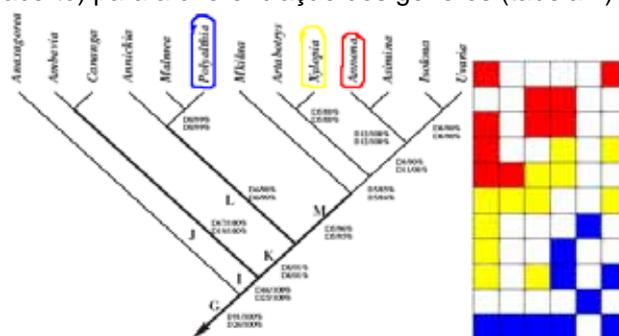


Figura 2. a) Similaridade entre os gêneros *Annona* (vermelho), *Xylopi*a (amarelo) e *Polyalthia* (azul) obtidos com dados moleculares e morfológicos combinados¹ b) SOM classificando os gêneros a partir de dados de RMN ¹³C de diterpenos.

Ao analisar o mapa obtido verificam-se três regiões nítidas, demonstrando que diterpenos com características químicas semelhantes foram isolados no mesmo gênero.

Conclusões

A alta correlação entre os dados de RMN ¹³C obtidos dos metabólitos é decorrente da via produtora dessas substâncias, formando compostos específicos para um determinado grupo, neste caso gêneros da família Annonaceae. Os dados de RMN ¹³C aplicados a SOM corroboram com os resultados obtidos de filogenia com dados moleculares e morfológicos¹ (figura 2a), podendo também auxiliar nos estudos quimiotaxonômicos e direcionar pesquisas sobre determinados compostos e sua ocorrência.

Agradecimentos

UFPB, FAPESP, CAPES.

¹Sauquet, H. ; Doyle, Ja ; Scharaschkin, T. ; Borsch, T. ; Hilu, KW ; Chatrou, LW ; Le Thomas, A. *Bot. J. Linn. Soc.*, **2003**, 142, 125.

²Andrade, N. C. ; Barbosa-Filho J. M. ; Agra M. F. ; da-Cunha E. V. L. ; Silva, M. S. ; *Recent Res. Devel. Phytochem.*, **2003**, 1.