

## Análise exploratória dos metabólitos secundários extraídos das folhas de *Vernonia condensata* Baker por FT-IR e métodos quimiométricos.

Sabrina Afonso<sup>1\*</sup> (PG), Letícia Mileny Santos<sup>1</sup> (IC), Estefânia Gastaldello Moreira<sup>2</sup> (PQ), Ieda Spacino Scarmínio<sup>1</sup> (PQ). \*sabrina\_quimica@hotmail.com

<sup>1</sup>Universidade Estadual de Londrina, Departamento de Química, CP 6001, Londrina-PR, 86051-990

<sup>2</sup>Universidade Estadual de Londrina, Departamento de Ciências Fisiológicas, CP 6001, Londrina-PR, 86051-990

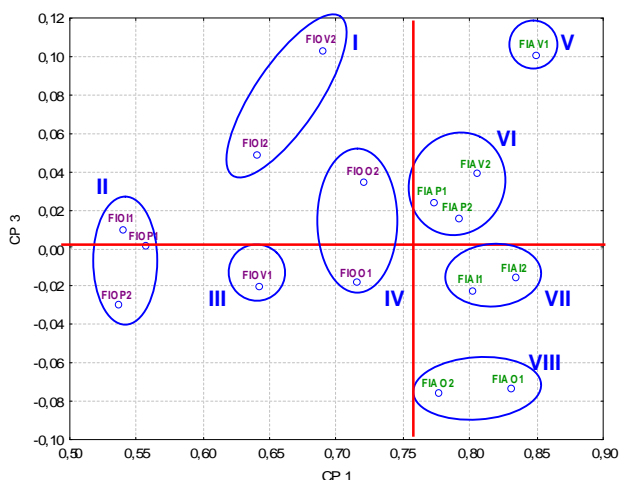
Palavras Chave: metabólitos secundários, *Vernonia condensata* Baker, infravermelho.

### Introdução

Os metabólitos secundários extraídos de plantas têm uma grande importância para a fitoquímica, medicina e possuem diversas aplicações industriais. Essas classes de compostos podem ser classificadas em três grupos com base na estrutura química: alcalóides, terpenóides e compostos fenólicos<sup>1</sup>. Sendo assim, o objetivo deste trabalho foi utilizar métodos quimiométricos de análise multivariada associados aos dados do infravermelho para avaliar as diferentes frações obtidas dos extratos de *Vernonia condensata* Baker. Os extratos orgânico, composto por 60% acetona, 30% diclorometano e 10% etanol, e aquoso das folhas secas coletadas nas quatro estações do ano foram fracionados por extração líquido-líquido<sup>2</sup> resultando em 5 diferentes frações para cada estação do ano. As frações dos extratos foram analisadas por espectrometria na região do infravermelho e os dados espectroscópicos foram analisados por métodos quimiométricos.

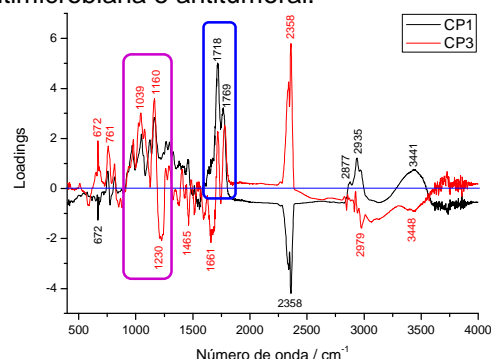
### Resultados e Discussão

A primeira componente principal, Figura 1, discriminou os extratos aquosos dos extratos orgânicos da fração de polaridade intermediária nas quatro estações do ano.



**Figura 1.** Gráfico dos escores da CP1 x CP3 da fração de polaridade intermediária dos extratos aquoso e orgânico, que explicam 97,24% da variância total dos dados.

O gráfico dos loadings das componentes 1 e 3, Figura 2, mostra as variáveis com maior influência na discriminação das amostras. Os números de onda em 1718 e 1769  $\text{cm}^{-1}$ , correspondente ao  $\nu\text{C=O}$  de  $\gamma$ -lactona, tem maior peso na separação dos grupos V, VI, VII e VIII (extrato aquoso). Os valores de 1039, 1160 e 1230  $\text{cm}^{-1}$ , que tem maior influência na separação dos grupos V e VI (verão e primavera) dos grupos VII e VIII (outono e inverno do extrato aquoso), podem ser atribuídos ao  $\nu\text{C-O}$  de lactonas, indicando a presença de lactonas sesquiterpênicas nos extratos de *Vernonia condensata* Baker, que podem apresentar uma ampla variedade de atividades biológicas e farmacológicas como atividade anti-inflamatória, antimicrobiana e antitumoral.



**Figura 2.** Gráfico dos loadings da CP1 x CP3 da fração de polaridade intermediária dos extratos aquoso e orgânico.

### Conclusões

Com a aplicação de métodos quimiométricos aos espectros do infravermelho foi possível traçar o perfil das diferentes frações identificando qualitativamente os grupos de composições químicas diferentes e determinar as regiões dos grupos funcionais que apresentam maior influência para discriminar a composição química das diferentes frações.

### Agradecimentos

Os autores agradecem à Capes e ao CNPq pelas bolsas e auxílio financeiro do projeto.

<sup>1</sup> Soares, P. K.; Bruns, R. E.; Scarmínio, I. S. *J. Sep. Sci.* **2009**, 32, 644

<sup>2</sup> Di Stasi, L.C. *Plantas medicinais: Arte e Ciência. Um guia de estudo interdisciplinar*, 1ª ed., Fundação Editora UNESP: São Paulo, **1996**.