

Planejamento e otimização de extração em espécies de *Jatropha* para estudos metabolômicos.

Alan Cesar Pilon¹(PG); Fausto Carnevale Neto¹(PG); Marcos Marçal Ferreira Queiroz¹(PG); Márcia Nasser Lopes¹(PQ); Dulce Helena Siqueira Silva¹(PQ); Vanderlan Bolzani¹(PQ); Ian Castro-Gamboa¹(PQ).

¹Núcleo de Bioensaios, Biossíntese e Ecofisiologia de Produtos Naturais– NuBBE – UNESP - Instituto de Química - Departamento de Química Orgânica, Rua Francisco Degni s/nº - 14800-900, Araraquara, São Paulo.

Palavras Chave: *Jatropha gossypifolia*, *Jatropha multifida*, quimiometria, simplex centróide

Introdução

A química de produtos naturais (QPN) ao longo da história forneceu inúmeras substâncias com potencial farmacológico, contudo, nas últimas décadas, as indústrias pouco tem investido na pesquisa e desenvolvimento em QPN devido principalmente à fatores econômicos e ao reduzido número de novas entidades químicas. Neste contexto, a visão reducionista inserida principalmente na cultura ocidental vêm sendo questionada e novas abordagens estão sendo aplicadas para o entendimento das relações inter e intra-específicas em toda complexidade em matrizes naturais^{1,2}. Assim, o emprego de técnicas de vanguarda que permitam obter uma amostragem completa de um dado organismo é fundamental para estudos posteriores. Nesta visão, a quimiometria cumpre esse papel, pois permite o planejamento, análise e otimização de experimentos multifatoriais, fornecendo subsídios para diversas abordagens como a metabolômica, a biologia sistêmica e a desrepliação^{1,2}. Neste trabalho foi planejado e otimizado experimentos de extração, aplicando um *design* em simplex centróide para as espécies *Jatropha multifida* e *J. gossypifolia*.

Resultados e Discussão

Inicialmente foram preparados quatorze extratos foliares distintos para cada espécie a partir de $1,0 \pm 0,1$ g de material vegetal e $10 \pm 0,1$ mL de solvente para a extração. Após filtração e evaporação dos solventes por meio de um speedvac, $30\mu\text{L}$ de cada extrato bruto ($5 \text{ mg}\cdot\text{mL}^{-1}$) foi injetado num cromatógrafo líquido de alta eficiência acoplado a um detector de arranjo de diodos. Desta forma foram gerados quatorze cromatogramas para cada espécie.

Em seguida, os cromatogramas foram analisados afim de avaliar quais os solventes com a maior capacidade de extração para o conjunto. A atribuição da escolha foi tomada a partir do número de bandas cromatográficas presentes nos cromatogramas. Para a espécie *J. multifida* os solventes foram: etanol, acetona e o 1,4 dioxano

enquanto para a *J. gossypifolia* foram: metanol, isopropanol e clorofórmio.

Posteriormente, foi aplicado um *design* de mistura em simplex centróide. Neste tipo de planejamento são realizados dez experimentos, sendo três deles constituídos de solventes puros escolhidos e sete experimentos compostos de misturas binárias e ternárias. A partir da análise do número de bandas cromatográficas de cada experimento foi possível construir uma equação através de ferramentas matemáticas de regressão, a qual possibilitou gerar gráficos de superfícies de contorno para cada espécie, Figura 1.

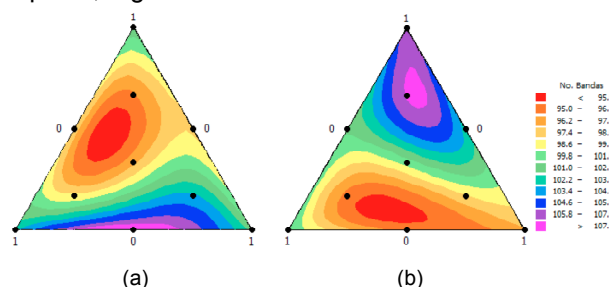


Figura 1. Superfície de contorno para as espécies:(a) *J. gossypifolia*; (b) *J. multifida*.

Analisando os gráficos da Figura 1 é presumível que a melhor condição de extração para a espécie *J. gossypifolia* está localizada na região de composição 1:1 clorofórmio : isopropanol e para *J. multifida* a fração 2/3:1/3:1/3 etanol : acetona : 1,4 dioxano.

Conclusões

O uso da quimiometria permitiu o planejamento e otimização dos extratos brutos através de experimentos em simplex centróide. Essa ferramenta oferece elementos fundamentais para estudos metabolômicos e revela a diversidade metabólica entre essas espécies de *Jatropha*.

Agradecimentos

Ao suporte financeiro FAPESP e CNPq

1.Barros Neto, B.; Scarmínio, I. S.; Bruns, R. E. *Statistical design chemometrics*. Amsterdam: Elsevier, 2006.

2.Verpoorte, R.; Choi, Y. H.; Kim, H. K. *Journal of Ethnopharmacology*, v. 100, p. 53-56, 2005.