

# ANÁLISE EXPLORATÓRIA DA IMPRESSÃO DIGITAL METABOLÔMICA EM FOLHAS DA ERVA-MATE

Ieda Spacino Scarminio<sup>1</sup>(PQ), Fernanda Delaroza<sup>1</sup>(PG), Leandro J. S. Duo<sup>1</sup>(PG), Miroslava Rakocevic<sup>2</sup>(PQ)  
fernandadelaroza@yahoo.com.br

<sup>1</sup> Universidade Estadual de Londrina - UEL, Departamento de Química, Laboratório de Quimiometria em Ciências Naturais, Rodovia Celso Garcia Cid km 380, 86051-980 Londrina, Paraná, Brasil,

<sup>2</sup> Instituto Agrônomo do Paraná - IAPAR, Rodovia Celso Garcia Cid km 375, 86047-902 Londrina, Paraná, Brasil.

Palavras Chave: ambiente luminoso, FTIR, espectroscopia UV-VIS, grupos metabólicos, quimiometria

## Introdução

*Ilex paraguariensis* St. Hil. (erva-mate) é uma espécie Sul-Americana, arbórea, dióica, originada de florestas subtropicais. O crescimento de erva-mate é geneticamente determinado e modificado por ambiente<sup>1</sup>. Ambiente luminoso e sexo mostraram o seu efeito no sensorial de chimarrão - a bebida preparada com folhas oriundas de plantas masculinas foi menos amarga do que das femininas, particularmente quando coletadas das ponteiros dos ramos ou em monocultura comparada com floresta<sup>2</sup>. Atualmente, muitas técnicas cromatográficas e espectrométricas são aplicadas para obter análise metabólica, por meio da “impressão digital dos metabólitos”, já que neste caso o perfil cromatográfico ou espectroscópico inteiro seria tomado como “composto ativo”<sup>3,4</sup>.

O objetivo do trabalho foi realizar os primeiros passos na análise exploratória do extrato bruto das folhas da erva-mate por análise quimiométrica visando obter subsídios para o desenvolvimento da impressão digital metabólica, diferenciando dois ambientes de cultivo de plantas descritos como machos cultivados em clareiras (mc) e machos sombreados (Ms).

## Resultados e Discussão

Através de um planejamento de misturas do tipo Centróide-Simplex<sup>5</sup>, representado por um tetraedro, com 4 componentes, obteve-se 15 extratos com duplicata no ponto central. As extrações foram realizadas com os solventes etanol (et), acetato de etila (ae), diclorometano (dc) e hexano (hx) nas seguintes proporções (et:ae:dc:hx %v): 1 (1:0:0:0 %v), 2 (0:1:0:0 %v), 3 (0:0:1:0 %v), 4 (0:0:0:1 %v), 5 (1:1:0:0 %v), 6 (1:0:1:0 %v), 7 (1:0:0:1 %v), 8 (0:1:1:0 %v), 9 (0:1:0:1 %v), 10 (0:0:1:1 %v), 11 (1:1:1:0 %v), 12 (1:1:0:1 %v), 13 (1:0:1:1 %v), 14 (0:1:1:1 %v) e 15 (1:1:1:1 %v). O gráfico das ACP (análise de componentes principais) nas projeções das componentes 3 com a componente 4 analisados em FTIR (Figura 1a) e das componente 1 com a componente 5 analisados em UV-VIS (Figura 1b) separaram os extratos das folhas machos quando cultivados nos dois ambientes luminosos, mc e Ms.

A separação foi mais significativa com os extratos submetidos à mistura quaternária 15 e ternárias 11, 12, 13 e 14. O gráfico das ACP da Figura 1b analisada em conjunto com o gráfico dos loadings, mostra que a separação dos extratos de misturas ternárias 12, 14 e quaternárias 15, das plantas macho de sombra estão no quadrante positivo da CP5 responsáveis pelos maiores valores de absorvância na região de 246 a 291 nm.

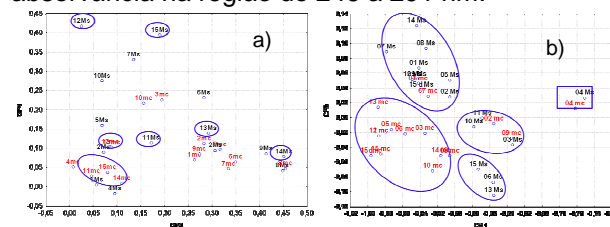


Figura 1. a) Gráfico dos escores das ACP 3 e 4 no confrontamento de machos cultivados em clareiras (mc) versus sombreados (Ms) por análise FTIR; b) Gráfico dos escores das ACP 1 e 3 no confrontamento machos cultivados em clareiras (mc) versus sombreados (Ms) por análise UV-VIS.

## Conclusões

Os meios extratores de mistura quaternária 15 e ternárias 11, 12, 13 e 14 mostram através da análise quimiométrica à discriminação das folhas *Ilex paraguariensis* St. Hil. machos quando cultivados em clareiras (mc) das cultivadas em sombra (Ms) nas duas técnicas espectroscópicas empregadas.

## Agradecimentos

À indústria ‘Baldo’, filial São Mateus do Sul, e ao engenheiro agrônomo Danilo Martim Domingos pelas amostras coletadas. À CNPq, CAPES e IICA que financiaram as bolsas de Pesquisador Visitante para Dra M. Rakocevic e a de pós-graduação de F. Delaroza.

<sup>1</sup>Rakocevic, M.; Martim S.F. *Journal of Biometeorology*. **2010**.

<sup>2</sup>Rakocevic M, Medrado MJS, Lavoranti OJ, Valduga. *Pesquisa Florestal Brasileira*. **2007** 54,71-83.

<sup>3</sup>Yan, S.K.; Xin, W.F.; Lou, G.A.; Wang, Y.M. e Cheng, Y.Y. *2005. Journal of Chromatography A*. **1990**, 90-97.

<sup>4</sup>Zhang, J.L.; Cui, M.; He, Y.; Yu, H.L.; Guo, D.. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*. **2005**, 36(5), 1029-1035.

<sup>5</sup> Neto, B.B.; Scarminio, I.S. e Bruns, R.E. *Editora da UNICAMP*. **2001**, 313-319.