

Aplicação de resolução multivariada de curvas (MCR-ALS) para deconvolução de dados CLAE-UV-DAD de *Solanum americanum*.

Alan C. Pilon(PG)*¹, Fausto Carnevale Neto(PG)¹, Rafael T. Freire(PG)¹, Renato C. Lajarim(PQ)², Vanderlan S. Bolzani(PQ)¹, Ian Castro-Gamboa(PQ)¹

¹Núcleo de Bioensaios, Biossíntese e Ecofisiologia de Produtos Naturais– NuBBE – UNESP - Instituto de Química -, Rua Francisco Degni 55 - 14800-900, Araraquara, São Paulo, - e-mail: leaoacp@yahoo.com.br

²Universidade Federal de São Carlos (UFSCar) – Departamento de Química

Palavras Chave: *S. americanum*, CLAE-UV-DAD, Desrepliação, MCR-ALS,

Introdução

A desrepliação é a principal ferramenta para triagem de metabólitos em plantas e outros organismos com alta complexidade molecular pois, evita o consumo excessivo de materiais e tempo nas etapas de otimização e identificação, priorizando a seleção dos metabólitos com potencial farmacológico. As principais plataformas analíticas, desta abordagem, são compostas pela cromatografia líquida de alta eficiência (CLAE), associadas a espectroscopia (UV-DAD e RMN) ou à espectrometria de massas de alta resolução (EMAR). O MCR-ALS, por sua vez, surge como uma nova ferramenta desta abordagem pois, permite a deconvolução de bandas cromatográficas em matrizes complexas. Neste trabalho foi executado a resolução multivariada de curvas por mínimos quadrados alternados (MCR-ALS) sob perfil cromatográfico do extrato de galhos de *Solanum americanum*¹.

Resultados e Discussão

O experimento de CLAE-UV-DAD utilizou um gradiente exploratório de 5-100% H₂O:MeOH (0,1% CH₃COOH) durante 30 minutos seguido por 10 minutos em 100% MeOH, coluna monolítica ODS C18, vazão de 3.0 mL min⁻¹, temperatura de 298 K e volume de injeção de 30 µL.

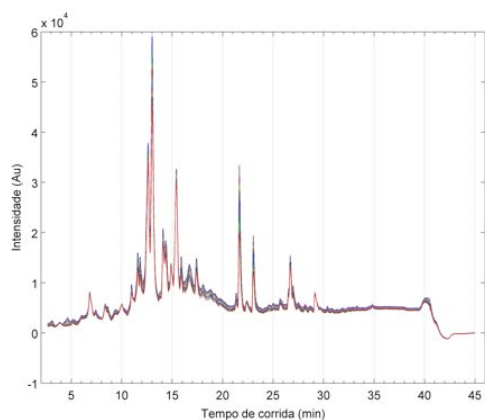


Figura 1. Extrato de galhos de *S. americanum*.

Previamente, sob o auxílio do software do CLAE-UV-DAD foram identificadas 88 bandas no perfil cromatográfico de *S. americanum* (254nm).

Após a execução do MCR-ALS foi possível detectar 158 bandas cromatográficas, um aumento de 80%, quando comparado ao dados originais (Fig. 2). A figura 3, mostra o perfil cromatográfico e os seus espectros recuperados para o intervalo de 12.8-13.3 minutos.

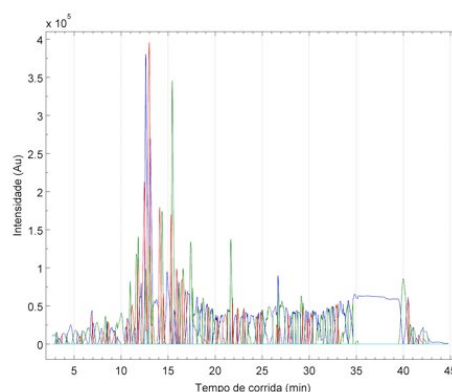


Figura 2. Perfil desconvoluído de *S. americanum* por MCR-ALS.

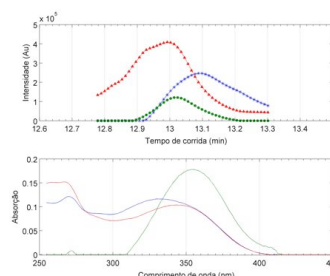


Figura 3. Perfil cromatográfico e espectral obtidos por MCR-ALS entre 12.8-13.3 minutos de corrida.

Conclusões

O MCR-ALS, aplicado a CLAE-UV-DAD, permite a detecção de um grande número de metabólitos, em condições não otimizadas (coeluição), oferecendo uma nova ferramenta para o desenvolvimento de estudos de desrepliação, em matrizes de alta complexidade molecular, com baixo consumo de materiais e tempo.

Agradecimentos

Agradeço a FAPESP, CNPq e CAPES pelo auxílio a pesquisa e a bolsa concedida.

¹ J. Jaumot, R. Gargallo, A. Juan, R. Tauler, *Chemometr. Intell. Lab.*, 76 (2005) 101–110.