



Seminários Gerais em Química II

Discente: Genilson Silva de Jesus

Orientadora: Profa. Dra. Nídia Cristiane Yoshida / **Coorientador:** Prof. Dr. João Batista G. Souza

Estudo químico de plantas do Cerrado e Pantanal comercializadas na medicina Popular Sul-Mato-Grossense: *Miconia albicans* (Sw.) Sreud.

A espécie *Miconia albicans* (Sw.) Steud, pertence à família Melastomataceae, é popularmente conhecida como canela-de-velho e é utilizada em comunidade indígenas e outras comunidades brasileiras em forma de chá para o tratamento de doenças estomacais, intestinais e dores nas articulações (artrose, artrite). A canela-de-velho, na forma de folhas secas e trituradas, tem recebido atenção nos últimos anos por ser amplamente comercializada em mercados populares e por raizeiros. Por essa razão, é fundamental o desenvolvimento de métodos que permitam verificar a identidade e a qualidade do material vegetal comercializado. Deste modo, o presente trabalho objetiva ampliar os conhecimentos acerca da composição química das folhas e caule de *M. albicans*, analisar o emprego da CLAE-EM e análise de quimiometria para a comparação do material vegetal comercializado com um espécime referência de *M. albicans* (com identificação botânica confirmada), e avaliar suas propriedades antimicrobianas contra cepas bacterianas *Escherichia coli* e *Staphylococcus aureus*. O estudo foi iniciado com a coleta e identificação do material vegetal de referência. O caule e as folhas, separadamente, passaram por processo de secagem, trituração e extração com etanol 95%. Em seguida, os extratos brutos foram particionados sucessivamente com hexano, clorofórmio e acetato de etila, resultando nas fases correspondentes. Os extratos e fases foram submetidos a análise do perfil químico por meio da técnica de CLAE-UV-EM, e foi conduzido o isolamento dos metabolitos secundários das folhas e caule utilizando-se da combinação de diferentes processos cromatográficos empregando sílica gel 60 (70-230 e 230-400 *mesh*) e Sephadex LH-20[®], sendo os compostos resultantes submetidos a análises de RMN de ¹H, de ¹³C e espectrometria de massas. Na análise do perfil químico por CLAE-UV-EM foi anotadas 19 substâncias, sendo derivados do ácido gálico e do ácido elágico, flavonóis glicosilados, triterpenos e feoforbídeos. Os fracionamentos cromatográficos resultaram, até o momento, no isolamento e determinação estrutural de 12 substâncias, sendo 6 triterpenos (esqualeno, lupeol, β -amirina, α -amirina, ácido betulínico e ácido corosólico), 1 esteroide (stigmasterol), 1 tocoferol (α -tocoferol) e 3 feoforbídeos (feoftina A, éster 13²-*epi*-feoforbídeo A, feoforbídeo B), resultando no total de 31 substâncias identificadas e/ou anotadas. Para o desenvolvimento do método de análise do material vegetal comercializado foi aplicado um tratamento multivariado (Análise de Componentes Principais – PCA, e de Agrupamentos Hierárquicos – HCA) de dados obtidos por CLAE-UV-EM de 4 amostras comerciais e 1 amostra referência de *M. albicans*. Na análise dos dados de CLAE-UV-EM por PCA, observou-se a separação das amostras de *M. albicans*, correspondendo a 53,8% da variância total e mostrando, como previsto por meio das impressões digitais em CLAE-UV-EM, pouca variabilidade entre os perfis químicos. De modo geral, as amostras apresentaram similaridade entre os perfis químicos, sendo observada discreta variação na quantidade relativa entre os compostos. Não foi detectada separação de acordo com a origem geográfica, já que uma das amostras era de procedência de outro estado. No entanto, tanto por PCA quanto por HCA, uma amostra apresentou-se mais distante das demais, sendo verificado a presença de contaminantes de origem vegetal distinta no pacote comercializado, o que pode ter influenciado na separação dessa amostra. Os candidatos que contribuíram para essa separação foram o ácido oleanoico (tempo de retenção $t_r = 40,6$ min, m/z 485,3791), α -amirina ($t_r = 40,8$ min, m/z 449,3872) e 13²-*epi*-feoforbídeo A ($t_r = 45,2$ min, m/z 621,3488). Todos os extratos e fases foram submetidos a testes de potencial biológico frente a cepas de bactérias *E. coli*, para a qual foram inativos, e *S. aureus*, com resultados promissores para as fases acetato de etila da folha e caule, com $CI_{50} = 62,5$ $\mu\text{g/mL}$.

Palavras-chave: Melastomataceae; *Miconia albicans*; tratamento multivariado; antimicrobiano.