

Discriminação Quimiotaxonômica de Líquens através da RMN de ^1H e Análises Quimiométricas dos Extratos Brutos e Material *in natura*

Gláucia Braz Alcantara^{*1} (PG), Andersson Barison¹ (PG), Antonio Gilberto Ferreira¹ (PQ), Neli Kika Honda² (PQ), Márcia Miguel Castro Ferreira³ (PQ)

¹Laboratório de RMN, Departamento de Química - Universidade Federal de São Carlos, São Carlos/SP. ²Laboratório de Pesquisa LP2, Departamento de Química, Universidade Federal de Mato Grosso do Sul, Campo Grande/MS. ³Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas/SP. - *glauca@dq.ufscar.br

Palavras Chave: Quimiotaxonomia de líquens, RMN, quimiometria.

Introdução

Os líquens, organismos de difícil diferenciação morfológica, apresentam uma relativa constância metabólica nas espécies, o que torna possível a sua classificação taxonômica através de análises químicas^{1,2}.

As informações sobre a composição metabólica podem ser acessadas através dos espectros de RMN de ^1H . No entanto, devido ao grande número de informações contidas nestes, a quimiometria tem se mostrado uma ferramenta valiosa para determinar e caracterizar plantas³.

Os espectros de RMN de ^1H , obtidos dos extratos liquênicos e das amostras *in natura*, foram submetidos às análises quimiométricas a fim de correlacionar as famílias, gêneros e espécies, propondo o emprego destes para a quimiotaxonomia de líquens.

Resultados e Discussão

Amostras de onze espécies de líquens, referentes a seis gêneros e duas famílias, foram coletadas e obtidos os espectros do material vegetal intacto (HR-MAS de ^1H – semi-sólido) e dos respectivos extratos acetônicos (RMN de ^1H - líquidos).

A análise quimiométrica por componentes principais (PCA), dos espectros de RMN de ^1H do extratos liquênicos, permitiu discriminar as amostras de acordo com as espécies e gêneros. Na figura 1, observa-se a distinção das espécies de um mesmo gênero (retângulo tracejado) em relação às demais.

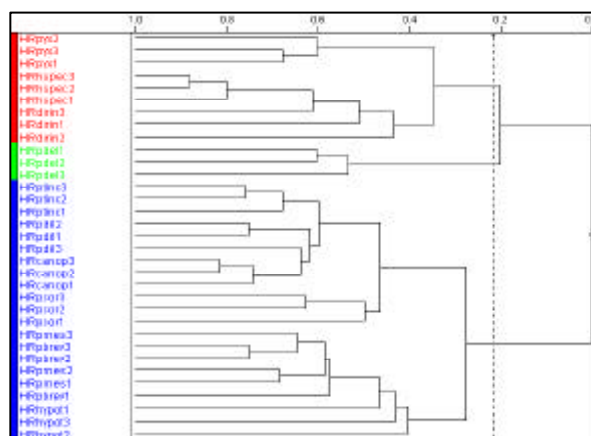
Figura 1. Gráfico de Scores (PC1xPC2) dos líquens



Parmeliaceae (análise dos extratos).

A análise quimiométrica, através de PCA e Análise Hierárquica de Clusters (HCA), dos espectros de HR-MAS de ^1H das amostras *in natura*, possibilitou uma satisfatória discriminação entre as famílias, gêneros e espécies. A Figura 2 ilustra a discriminação entre as famílias Phisiaceae (em vermelho) e Parmeliaceae (em azul). Apenas uma das espécies Parmeliaceae apresentou comportamento anômalo (em verde).

Figura 2. Dendrograma de HCA de todas as amostras



analisadas via RMN HR-MAS de ^1H (material *in natura*).

Conclusões

A RMN aliada a quimiometria tem se mostrado uma ferramenta útil na determinação quimiotaxonômica de líquens. Por meio da RMN de líquidos, pode-se efetuar a caracterização de gêneros e espécimes, e por HR-MAS de ^1H , uma técnica de análise direta do material *in natura*, a discriminação foi mais eficiente, distinguindo as famílias, gêneros e espécies.

Agradecimentos

CAPES, CNPq e FAPESP

¹Quilhot, W.; Lighton, G.; Flores, E.; Fernandes, E.; Pena, W.; Guzman, G. *Acta Farm. Boranense*, **1987**, 6:1, 15.

²Huneck, S.; Yoshimura, I. *Identifications of Lichen Substances*, Springer, **1996**.

³Ward, J. L. *et al. Phytochem.* **2003**, 62, 949.