

ANOTAÇÃO DE COMPOSTOS PRESENTES EM *BACCHARIS TRIMERA* E *BACCHARIS CRISPA* UTILIZANDO A PLATAFORMA GNPS

Lorena de Mendonça Lucena

Laboratório de Produtos Naturais e Análises Metabolômicas (LAPRONAM), Departamento de Antibióticos, Universidade Federal de Pernambuco, Pernambuco (PE) Brasil

Renally Cristina Lima da Silva

Laboratório de Produtos Naturais e Análises Metabolômicas (LAPRONAM), Departamento de Antibióticos, Universidade Federal de Pernambuco, Pernambuco (PE) Brasil

Dhebora Letycia Barcelos da Silva

Laboratório de Produtos Naturais e Análises Metabolômicas (LAPRONAM), Departamento de Antibióticos, Universidade Federal de Pernambuco, Pernambuco (PE) Brasil

Vitória Cristina Pontes de Queiroz

Laboratório de Produtos Naturais e Análises Metabolômicas (LAPRONAM), Departamento de Antibióticos, Universidade Federal de Pernambuco, Pernambuco (PE) Brasil

Rafael Gomes Correia

Laboratório de Produtos Naturais e Análises Metabolômicas (LAPRONAM), Departamento de Antibióticos, Universidade Federal de Pernambuco, Pernambuco (PE) Brasil

Gemima Azevedo Alves

Laboratório de Produtos Naturais e Análises Metabolômicas (LAPRONAM), Departamento de Antibióticos, Universidade Federal de Pernambuco, Pernambuco (PE) Brasil

Josefa Grazielle Silva Fonseca

Laboratório de Produtos Naturais e Análises Metabolômicas (LAPRONAM), Departamento de Antibióticos, Universidade Federal de Pernambuco, Pernambuco (PE) Brasil

Rafaela Klauck da Silva

Laboratório de Produtos Naturais e Análises Metabolômicas (LAPRONAM), Departamento de Antibióticos, Universidade Federal de Pernambuco, Pernambuco (PE) Brasil

Liliane Bezerra de Lima

Laboratório de Produtos Naturais e Análises Metabolômicas (LAPRONAM), Departamento de Antibióticos, Universidade Federal de Pernambuco, Pernambuco (PE) Brasil

Rosana Casoti

Laboratório de Produtos Naturais e Análises Metabolômicas (LAPRONAM), Departamento de Antibióticos, Universidade Federal de Pernambuco, Pernambuco (PE) Brasil

RESUMO

A *Baccharis trimera*, conhecida como carqueja, está listada na 6^a Edição da Farmacopeia Brasileira¹. No entanto, devido à sua semelhança com outras espécies do mesmo gênero, é facilmente adulterado. Isso destaca a necessidade de novas metodologias para melhorar o controle de qualidade desse material vegetal. O presente estudo teve como objetivo diferenciar entre *B. trimera* e *B. crispa* por seus perfis químicos usando metabolômica e espectrometria de massas. Para isso, foram coletadas dez amostras de partes aéreas de cada espécie em diferentes regiões do Brasil ao longo de diferentes anos, sempre durante a época de floração. Após a coleta, as espécies foram identificadas, secas e pulverizadas. Um extrato hidroetanólico a 70% foi preparado usando 10 mg de cada amostra, depois filtrado e analisado por Cromatografia Líquida de Ultra-Alta Eficiência acoplada a Espectrômetro de Massas de Alta Resolução (UHPLC-HRMS). Os dados resultantes foram pré-processados usando o software MZmine e, em seguida, carregados na plataforma Global Natural Products Social Molecular Networking (GNPS)², onde redes moleculares foram formadas com base nos padrões de fragmentação dos compostos. Os compostos anotados foram comparados com os dados de revisão da literatura para as espécies *B. trimera* e *B. crispa*³. A análise do GNPS facilitou a formação de redes moleculares, com três grandes redes pertencentes à classe dos flavonoides, subdivididas em redes de flavonoides aglicosilados, flavonoides C-glicosilados e flavonoides com glicosilação no anel B — compostos incomuns dentro do gênero *Baccharis*. A desreplicação revelou na literatura compostos conhecidos como rutina, kaempferol 3-O-rutinosídeo e apigenina³. No total, 134 compostos foram anotados para *Baccharis trimera* e *Baccharis crispa*, dos quais 48 compostos eram conhecidos, enquanto 86 permanecem descaracterizados. Valores m/z não anotados dentro da mesma rede sugerem que sua classificação faz parte da mesma classe na qual estão inseridos. Portanto, mais estudos são necessários para possibilitar a desreplicação de mais compostos, melhorando o controle de qualidade da espécie terapêutica *B. trimera*.

Palavras-chave: Quimiotaixonomia, Anotação química, LC-MS, Metabolômica, Desreplicação, GNPS.



REFERÊNCIAS

BRAZIL. National Health Surveillance Agency. Brazilian Pharmacopoeia. 6th ed. Brasília: ANVISA, 2019.

WANG, M. et al. Sharing and community curation of mass spectrometry data with Global Natural Products Social Molecular Networking. *Nature Biotechnology*, v. 34, n. 8, p. 828-837, 2016. PMID: 27504778. Available at: <https://www.nature.com/articles/nbt.3597>. Accessed in: 22 nov. 2024.

CAMPOS, F.R., et al. Baccharis (Asteraceae): Chemical Constituents and Biological Activities. *Review. Chemical and Biodiversity*. v.13, p.1-17, 2016.