

Metabolômica *untargeted* por UHPLC-MS em processos pré-tratamento biológico de torta de pinhão-manso por macrobasidiomicetos

Miriã de Almeida Souza¹, Marina Borges Guimarães², José Antônio de Aquino Ribeiro³, Jorge Candido Rodrigues Neto⁴, Simone Mendonça⁵, Félix Gonçalves de Siqueira⁶, Patrícia Verardi Abdelnur⁷

Resumo

A crescente demanda por fontes para a produção de biocombustíveis tem levado à utilização de vegetais como matérias-primas. O pinhão-manso é uma fonte vegetal que apresenta potencial para a produção de biodiesel, mas é necessário avaliar a sua toxicidade devido à presença da curcina e ésteres de forbol em concentrações relativamente altas. A metabolômica auxilia na elucidação de tais substâncias químicas, permitindo a avaliação abrangente e simultânea de todos (ou quase todos) os metabólitos microbianos. Assim, este trabalho avaliou o perfil químico dos metabólitos presentes na torta de semente pinhão-manso (TSPM) biotransformada pelo macrobasidiomiceto *Pleurotus pulmonarius* (EF88), por meio da estratégia de metabolômica *untargeted* por UHPLC-MS. O EF 88 foi cultivado no sistema de fermentação estado sólido tendo TSPM como substrato, com umidade ajustada para 65%, por 15 dias a 28 °C. A TSPM-EF88 e TSPM (controle) foram secas a 40 °C por 24 h e maceradas. A extração dos metabólitos foi feita utilizando 10 mg do material macerado e 1 mL de solvente (etanol 80%, etanol 50%, etanol 30% ou água 100%). As amostras foram então submetidas a um banho ultrassônico por 10 minutos, centrifugadas por 3 min (1200 rpm) e o sobrenadante coletado foi filtrado com membrana de PVDF (Millex-GV) e analisados por UHPLC-MS. A separação dos analitos foi realizada no UHPLC (*Shimadzu*), empregando uma coluna C18 HSS T3, com eluente A (água com ácido fórmico 0,1%) e eluente B (acetonitrila com ácido fórmico 0,1 %) por 14 min. O espectrômetro de massas (*Bruker*) foi operado no modo *ESI(-)* e *ESI(+)*, com uma voltagem do capilar de 4,2 kV e na faixa de massa *m/z* 80-1200. Os dados de massas foram submetidos à análise de componentes principais (PCA) com auxílio dos *softwares* XCMS e MetaboAnalyst. A PCA destacou as semelhanças e diferenças entre as amostras, separando-as em dois grupos correspondentes à TSPM-EF88 e TSPM. Nas análises por UHPLC-*ESI(-)*-MS, os íons *m/z* 243,0629 e 326,2331 foram característicos para o agrupamento das amostras de TSPM-EF88, enquanto os íons *m/z* 341,1197 e 683,2267 nas amostras de TSPM. Já nas análises por UHPLC-*ESI(+)*-MS, os íons *m/z* 120,0812 e 136,0618 se destacaram na amostra TSPM-EF88, e *m/z* 325,1115 e 232,1080 na TSPM. A estratégia de metabolômica *untargeted* comprovou a alteração na composição metabólica da TSPM antes e depois do cultivo do macrobasidiomiceto. O próximo passo será a identificação dos metabólitos de interesse que podem ser correlacionados e aplicados no setor agroindustrial.

Auxílio Financeiro: Capes.

Palavras-chave: *Jatropha curcas*. macrofungos. perfil químico. UHPLC-MS.

¹ Mestranda em Química, Universidade Federal de Goiás, miria.souza@colaborador.embrapa.br.

² Farmacêutica, mestranda em Ciências da Saúde, Universidade de Brasília, marina.borges@colaborador.embrapa.br.

³ Farmacêutico, mestre em Ciências Farmacêuticas, Universidade Federal de Minas Gerais, jose.ribeiro@embrapa.br.

⁴ Químico, doutorando em Química, Universidade Federal de Goiás, jorge.rodrigues@colaborador.embrapa.br.

⁵ Farmacêutica, doutora em Saúde Pública, pesquisadora da Embrapa Agroenergia, simone.mendonca@embrapa.br.

⁶ Biólogo, doutor em Biologia Molecular, pesquisador da Embrapa Agroenergia, felix.siqueira@embrapa.br.

⁷ Química, doutora em Química Orgânica, pesquisador da Embrapa Agroenergia, patricia.abdelnur@embrapa.br.