

Núcleo de Produção Vegetal

Identificação dos metabólitos secundários majoritários da castanheira (*Bertholletia excelsa*) via análises metabolômica

Elisângela Xavier Andrade¹, Lúcia Helena de Oliveira Wadt², Geisa Paulino Caprini Evaristo³

O uso de plantas para tratamento e prevenção de doenças data de épocas remotas, sendo o conhecimento passado de geração para geração e constituindo uma base para pesquisa de novos fármacos. A *Bertholletia excelsa*, conhecida popularmente como castanheira, tem grande importância na economia da região Amazônica e para as comunidades tradicionais, sendo utilizada na medicina popular como infusão para tratamentos de diarreia, menopausa, diabetes, inflamação e como antibiótico. Existem relatos na literatura do uso do suco do fruto ou água do ouriço para hepatite, anemia e problemas intestinais e a casca do caule como chá para agente antimalárico. Apesar de ser bastante utilizada na forma de extratos aquosos, são poucos os constituintes químicos descritos na literatura da *B. excelsa*. O objetivo geral deste estudo é identificar os principais metabólitos secundários presentes na casca tronco da *Bertholletia excelsa* utilizando a técnica de análise metabolômica pela alta capacidade de extração, detecção analítica e sensibilidade. A coleta das cascas do tronco, foi realizada no campo experimental da Embrapa em Porto Velho/RO localizado na Rodovia BR 364 Km 55 em 06/08/2020. Exsicata do material coletado foi depositada para identificação taxonômica no Herbário Rondoniense João Geraldo Kuhlmann. O acesso ao patrimônio genético foi registrado no Sistema Nacional de Gestão do Patrimônio Genético e do Conhecimento Tradicional Associado (SisGen) com o código A29CF67. Foram coletadas amostras de três árvores com Diâmetro de Peito (DP) de 172,6; 156,0 e 69,8 cm, no período da manhã. As amostras foram processadas no Laboratório de Biomoléculas Aplicadas a Saúde (CEBio), sendo secas a 40 °C por 24 horas, trituradas e extraídas com água ultra pura em decocção [AN1], com água ultra pura a temperatura ambiente [AN2], e com metanol [AN3]. O método de análise dos extratos utilizou a cromatografia líquida de ultra eficiência acoplada à espectrometria de massa sequencial (UHPLC-MSn). O extrato obtido segundo o uso popular em uma solução de 10% de metanol e depois centrifugadas a 14.000 g, por 10 minutos e 4 °C. Os sobrenadantes foram analisados por cromatografia por meio do UHPLC DionexUltimate 3000 (Thermo Fisher Scientific, EUA) com uma coluna C18 (2,1 mm × 50 mm, 1,8 µm tamanho da partícula, 100 Å, Agilent Zorbax) aquecida a 40 °C, usando fluxo de 0,5 ml/min, e como fase móvel "A" água ultra pura com 0,1% de ácido fórmico (AF) e 5 mM de formiato de amônio (FA), e como fase móvel "B" metanol com 0,1% de AF e 5 mM e FA. O gradiente de eluição seguiu as etapas de 10% B no primeiro min.; 100% B em 11 min; 100% B em 16min; 10% B em 17 até 20 min. O equipamento Q Exactive™ Orbitrap Plus (Thermo Fisher Scientific, Bremen, GE), controlado pelo software Xcalibur™ 3.2. Os espectros de massas foram submetidos a busca em nove bancos de dados via software Compound Discoverer (Thermo Fisher Scientific, EUA). As amostras foram analisadas em triplicatas biológicas e técnicas. Foram identificados 16.238 produtos do metabolismo das moléculas (analitos). Destes, apenas 1.798 metabólitos foram identificados, e os 14.440 mil analitos restantes, apesar de apresentarem massa molecular exata e (alguns) fórmula molecular sugerida, não puderam ser identificados, pois não apresentaram registros nos bancos de dados sendo, provavelmente, metabólitos secundários inéditos. Dentre os metabólitos identificados, os de maior concentração foram: ácido octadecadienoico, ácido α-eleostárico, ácido 4-acetamidobutanoico, glicose, ácido 9-oxo-octadeca-10,12-dienoico, pirogalol, arginina, teofilina, ácido gálico, ácido elágico, sacarose,

¹ Mestranda do Curso de Pós-graduação em Conservação e Uso de Recursos Naturais UNIR; exandrade@ig.com.br

² Doutora em Genética de Populações e Manejo Florestal – Embrapa Rondônia

³ Doutora em Bioquímica e Biotecnologia - Fiocruz

colina, epigalocatequina, ácido linoleico e ácido penicílico. Este trabalho contribui para o conhecimento preliminar dos metabólitos secundários majoritários presentes na casca do tronco da *Bertholletia excelsa*, evidenciando componentes ainda não descritos nos principais bancos de dados.

Palavras-chave: *Bertholletia excelsa*, metabólitos secundários, metabolômica.