

A

APLICAÇÃO DAS TÉCNICAS ESPECTROSCÓPICAS DE RMN E IV E DE MÉTODOS QUIMIOMÉTRICOS NA QUIMIOTAXONOMIA DE LIQUENS**APPLICATION OF NMR AND IR TECHNIQUES AND CHEMOMETRIC METHODS IN LICHEN CHEMOTAXONOMY****GLAUCIA BRAZ ALCANTARA****Endereço atual/Current address:** Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, 13565-905, São Carlos, São Paulo, Brasil/Department of Chemistry, Federal University of São Carlos, São Carlos, São Paulo, Brazil; e-mail: glabraz@yahoo.com.br**Tese de Doutorado/Doctorate Thesis:** Programa de Pós-Graduação em Química, Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, São Paulo, Brasil/Postgraduate Program in Chemistry, Department of Chemistry, Federal University of São Carlos, São Carlos, São Paulo, Brazil**Defendida/Defended:** 2.II.2007**Orientador/Advisor:** Prof. Dr. Antonio Gilberto Ferreira, Programa de Pós-Graduação em Química, Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, São Paulo, Brasil/Postgraduate Program in Chemistry, Department of Chemistry, Federal University of São Carlos, São Carlos, São Paulo, Brazil**Co-orientador/Co-advisor:** Profa. Dra. Neli Kika Honda, Departamento de Química, Universidade Federal de Mato Grosso do Sul, Campo Grande, Mato Grosso do Sul, Brasil/Department of Chemistry, Federal University of Mato Grosso do Sul, Campo Grande, Mato Grosso do Sul, Brazil

RESUMO: O trabalho descreve a análise quimiotaconômica de líquens a partir da utilização das técnicas de Ressonância Magnética Nuclear, RMN HR-MAS (High Resolution – Magic Angle Spinning) e em solução, e espectroscopia na região do infravermelho (IV), aliadas aos métodos quimiométricos. As análises foram efetuadas empregando-se um conjunto de 11 espécies de líquens distribuídas em duas famílias e seis gêneros. Os espectros de RMN HR-MAS, obtidos a partir do material vegetal intacto, possibilitaram, juntamente com a quimiometria, a discriminação entre famílias, gêneros e espécies, além de um percentual de classificação muito satisfatório (70,8%). As substâncias analisadas compreendem a classe dos carboidratos de baixa massa molecular, os polióis. As análises de RMN em solução, correspondentes aos extratos brutos, permitiram a discriminação de gêneros e espécies e a classificação foi excelente (88,9%). Na análise em que os metabólitos secundários de líquens são avaliados, realizou-se a identificação, em mistura, de algumas substâncias. A análise por IV, obtida a partir do material intacto, destacou-se por seu excelente poder de classificação de amostras (100% de predições corretas), com discriminação entre gêneros e espécies. A aplicação comparativa dessas técnicas espectroscópicas corrobora os resultados obtidos separadamente e aponta para a grande potencialidade do IV em análises quimiotaconômicas de líquens, por sua rapidez e baixo custo, embora as técnicas de RMN sejam muito atrativas quando se deseja análise minuciosa do perfil espectral.

PALAVRAS-CHAVE: Espectroscopia de infravermelho, líquens, quimiometria, quimiotaconomia, ressonância magnética nuclear, RMN HR-MAS.

ABSTRACT: The work describes the chemotaxonomic analysis of lichens using the Nuclear Magnetic Resonance, HR-MAS (High Resolution – Magic Angle Spinning) and solution NMR, and Infrared spectroscopy (IR) together with chemometric methods. The analyses were carried out for 11 lichen species distributed in two families and six genera. HR-MAS NMR spectra obtained from intact material, together with the chemometrics, provided the

discrimination between families, genera, and species, and the classification percentage achieved a satisfactory level (70.8%). The substances that were analyzed encompass the low molecular weight carbohydrate class named polyols. The solution NMR analyses, which corresponded to the crude extracts, allowed the discrimination between genera and species and the classification was considered excellent (88.9%). In the analysis to evaluate the secondary metabolites of lichens, we identified some substances in the mixture. IR analysis, carried out using intact material, presented the best results due to its excellent sample classification (100% of correct prediction) to discriminate genera and species. The comparative application of these spectroscopic techniques confirms the results obtained separately and points out IR great potential in chemotaxonomic analysis of lichens because it is quick and low-cost, although both NMR techniques are very attractive when a detailed analysis of the spectral profile is desired.

KEY WORDS: Infrared spectroscopy, lichens, chemometrics, chemotaxonomy, nuclear magnetic resonance, HR-MAS NMR.