

A Ciência e os caminhos do desenvolvimento
Verificação da qualidade do alinhamento de espectros de RMN de ^1H através de cálculos de similaridade

Junio Rangel Botelho, Denise Dagnino, Jan Schripsema

Em estudos de metabolômica baseados em RMN, as análises de extratos biológicos fornecem espectros que podem ser interpretados como perfis metabólicos. O desalinhamento espectral, que ocorre quando os deslocamentos químicos de compostos iguais são diferentes entre os perfis, prejudica a observação da variabilidade entre as amostras¹. Esse problema pode ser resolvido através do uso de alguns métodos, como por exemplo, o alinhamento local pelo algoritmo *icoshift*² ou o alinhamento de espectros baseado na similaridade³. Porém, esses métodos devem ser usados com cautela, pois mudanças nos deslocamentos químicos de compostos iguais em diferentes espectros indicam diferenças entre as amostras, e essas diferenças podem ser importantes³. A utilização dos cálculos de similaridade pode auxiliar na verificação da qualidade do alinhamento de espectros, e revelar informações ligadas à causa das variações de deslocamentos químicos³. 52 espectros de RMN de ^1H foram obtidos a partir das análises de extratos apolares de 25 amostras comerciais de *Peumus boldus* Molina. Os cálculos de similaridade feitos com esses dados espectrais, alinhados por meio de dois métodos distintos^{2,3}, foram usados na construção de tabelas de similaridade². Os espectros individuais tiveram suas similaridades calculadas em relação aos espectros de todas as amostras². Uma boa linearidade foi observada na comparação entre os valores de similaridade calculados a partir dos dados espectrais alinhados pelos dois métodos utilizados^{2,3}. Também foi possível notar que o alinhamento local por *icoshift*, que divide os espectros em 50 segmentos e os alinha individualmente², aumentou mais acentuadamente os valores de similaridade entre um grupo específico de pares de espectros. Além disso, foi possível constatar que a elevação da temperatura em análises de uma mesma amostra fez com que sinais entre 1,36 e 1,20 ppm ficassem deslocados à esquerda. Por esse motivo, no alinhamento local por *icoshift*, esses sinais foram os que apresentaram os maiores deslocamentos à direita, quando consideramos essa mesma região em todos os espectros. Portanto, os cálculos de similaridade possibilitaram a verificação da qualidade do alinhamento de espectros alinhados por diferentes métodos.

Palavras-chave: Metabolômica, RMN de ^1H , Similaridade.

Referências:

1. Defernez, M.; Colquhoun, I. J. **Phytochemistry**, v. 62, n. 6, p. 1009-1017, 2003.
2. Savorani, F.; Tomasi, G.; Engelsen, S. B. **J Magn Resonance**, v. 202, n. 2, p. 190-202, 2010.
3. Schripsema, J. **Metabolomics**, v. 15, n. 3, p. 39, 2019.

Instituições de fomento: CNPq, FAPERJ, IFFluminense.