



# XI ENCONTRO BRASILEIRO DE ECOLOGIA QUÍMICA XI BRAZILIAN MEETING ON CHEMICAL ECOLOGY

October 23-26, 2019  
Maceió, Brazil

## AVALIAÇÃO ECO-METABOLÔMICA DE CULTIVOS COMERCIAIS: UMA BUSCA POR MECANISMO DE RESISTÊNCIA E COMPOSTOS BIOATIVOS

Moacir Rossi Forim<sup>1</sup>, Erika Thalyta Veras Pereira<sup>1</sup>, Maria Clara Santana Aguiar<sup>1</sup>, Flávia Rego de Aquino<sup>1</sup>, Ana Paula Felizatti<sup>1</sup>, Maria Fátima das Graças Fernandes da Silva<sup>1</sup>, João Batista Fernandes<sup>1</sup>, Marcelo Mueller Freitas<sup>2</sup>, Carlos Alessandro de Freitas<sup>2</sup>, Arlindo Leal Boiça Junior<sup>2</sup>.

<sup>1</sup>Universidade Federal de São Carlos, Departamento de Química, Brasil [mforim@ufscar.br](mailto:mforim@ufscar.br); <sup>2</sup>Universidade Estadual Paulista "Julio Mesquita Filho", Faculdade de Ciências Agrárias e Veterinárias, Brasil.

**PALAVRAS-CHAVE:** CULTIVOS COMERCIAIS; INSETOS PRAGAS; PERFIL ECO-METABOLÔMICO; COMPOSTOS BIOATIVOS.

**RESUMO:** Eco-metabolômica é a aplicação de técnicas metabolômicas à ecologia, a fim de caracterizar as respostas e as interações bioquímicas dos organismos com o meio ambiente. Abordagens metabolômicas não direcionadas fornecem um mapa sobre o conteúdo metabólico das plantas, sob condições bióticas e/ou abióticas específicas. Esse conhecimento pode fornecer maneiras de manipular a interação entre os herbívoros (a praga) e as plantas (cultura), por exemplo, reduzindo o impacto negativo no rendimento, na qualidade dos alimentos e no meio ambiente. Neste trabalho, estamos estudando as interações de culturas comerciais de *Gossypium hirsutum* e insetos pragas do gênero *Spodoptera*. Nosso principal objetivo é entender os mecanismos de defesa constitutivos e induzidos para esta planta, procurando compostos bioativos. Folhas de diferentes genótipos dessa espécie, sob pressão biótica e abiótica, foram analisadas por Cromatografia Líquida de Ultra Alta Eficiência hifenada com Espectrometria de Massas de Alta Resolução (UHPLC-QToF MS) e por Cromatografia Gasosa hifenada com Espectrometria de Massas (GC-MS/MS). Para melhor entendimento dos sistemas, o perfil metabolômico foi avaliado em conjunto com análises estatísticas avançadas e ensaios biológicos. Medidas comparativas não supervisionadas agruparam plantas resistentes e suscetíveis, bem como metabólitos correlacionados. Os mecanismos constitutivos e induzidos de resistência dos diferentes genótipos foram associados a compostos orgânicos voláteis e não voláteis, como álcoois e aldeídos de seis átomos de carbono, derivados de indol e flavonóides, etc. Este estudo mostra o potencial metabolômico para identificar compostos bioativos envolvidos na defesa de plantas.

## COMMERCIAL CROPS ECO-METABOLOMIC EVALUATION: A SEARCH FOR RESISTANCE MECHANISM, AND BIOACTIVE COMPOUNDS

**KEYWORDS:** COMMERCIAL CROPS; PEST INSECTS; ECO-METABOLOMIC PROFILING; BIOACTIVE COMPOUNDS.

**ABSTRACT:** Eco-metabolomics is the application of metabolomics techniques to ecology in order to characterize answers, and biochemical interactions of organisms to their environment. Untargeted metabolomic approaches provide a map about the metabolic content of plants, under specific biotic, and/or abiotic conditions. This knowledge may provide ways to manipulate the interaction between herbivores (the pest) and plants (crop), for example, by reducing the negative impact on yield, food quality, and to the environment. In this work, we are studying the interactions of commercial crops such as *Gossypium hirsutum* and *Glycine max*, and pest insects of *Spodoptera* genus. Our aim is to understand the constitutive and induced defense mechanisms of both plants, looking for bioactive compounds. Leaves of different genotypes of both species, under abiotic and biotic pressure, they have been analyzed by Ultra-High Performance Liquid Chromatography hyphenated with High Resolution Mass Spectrometry (UHPLC-QToF MS), and by Gas Chromatography hyphenated with Mass Spectrometry (GC-MS/MS). For a better understanding of the systems, the metabolomic profiling have been evaluated together with advanced statistical analysis, and biological assays. Unsupervised comparative measures grouped resistant and susceptible plants as well as correlated metabolites. Resistant and induced mechanisms to those genotypes were associated of volatile and nonvolatile organic compounds such as alcohols and aldehydes of 6 carbon atoms, indole and flavonoid derivatives, etc. This study shows the potential of metabolomics to identify bioactive compounds involved in plant defense