

ANÁLISE QUIMIOSSISTEMÁTICA DA FAMÍLIA MYRISTICACEAE: A VIA MISTA (ACETATO/CHIMATO)

Raquel M. de S. N. Sampaio^{a,*}, , Adriana L. de Sousa^b, Rodrigo B. B. Feitoza^a, Rodrigo R. de Oliveira^a e Maria Raquel G. Vega^a

^aLaboratório de Ciências Químicas, Centro de Ciência e Tecnologia, Universidade Estadual do Norte Fluminense Darcy Ribeiro, Avenida Alberto Lamego 2000, 28013-602 Campos dos Goytacazes – RJ, Brasil

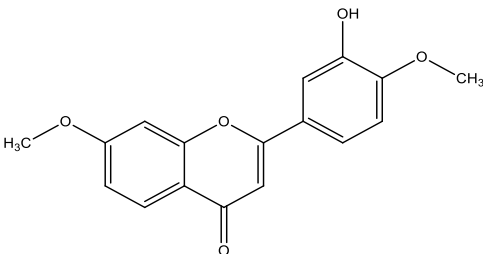
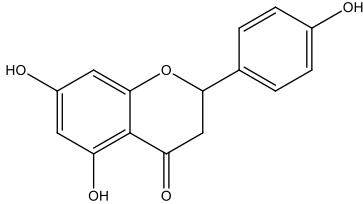
^bInstituto Federal Fluminense, R. Dr. Siqueira, 273, 28030-130 Campos dos Goytacazes – RJ, Brasil

Recebido: 28/02/2025; aceito: 23/06/2025; publicado online: 21/07/2025

*e-mail: rmsn17@pq.uenf.br

A Tabela 1S apresenta um exemplo de ficha catalográfica contendo duas micromoléculas da via mista identificadas nos gêneros *Virola* e *Iryanthera* da família Myristicaceae. Esse exemplo tem como objetivo facilitar a compreensão do leitor sobre o processo utilizado para obter os resultados deste estudo.

Tabela 1S. Ficha catalográfica dos metabólitos Tithonine e Engeletin identificados nos gêneros *Virola* e *Iryanthera* da família Myristicaceae: via mista

Ficha Catalográfica de metabólitos especiais oriundos da via mista, presentes nos gêneros <i>Virola</i> e <i>Iryanthera</i> , da Família Myristicaceae	
Gênero: <i>Virola</i> (<i>V</i>)	
Metabólito especial	 tithonine (1) Categoria molecular: favona $NO_v = 3$
Precursor do metabólito	 Categoria molecular: flavanona (naringenina)
Índices químicos particulares	$x = 9; h = 13; n = 17; n = 17; q = 0; f = 0; c = 0; u = 2$
Índices químicos moduladores	$IG = 0/3 = 0; IM = 2/3 = 0,667; IPt = 2/3 = 0,667; ID = 1/3 = 0,333$
Nível de oxidação (O) e nível de especialização do esqueleto (E)	$O_v = \frac{9 - 13}{17} = -0,235$ $E_v = \frac{0 + 0 + 0 + 2}{17} = 0,118$

$$AE_G = \frac{\sum G}{NO} = \frac{0}{3} = 0$$

Parâmetros de avanço evolutivo de glicosilação (AE_G), de metilação (AE_M), de proteção total (AE_{Pt}) e desproteção (AE_D)

$$AE_M = \frac{\sum M}{NO} = \frac{0,667}{3} = 0,222$$

$$AE_{Pt} = \frac{\sum Pt}{NO} = \frac{0,667}{3} = 0,222$$

$$AE_D = \frac{\sum D}{NO} = \frac{0,333}{3} = 0,111$$

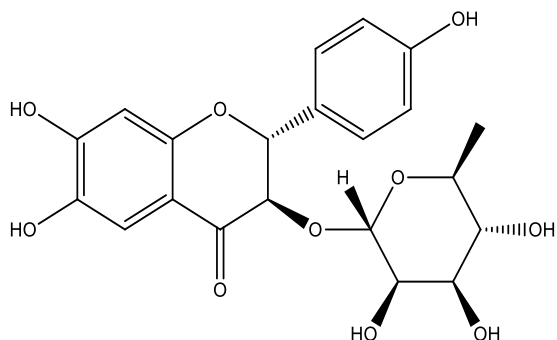
Parâmetros de avanço evolutivo de oxidação (AE_o) e de especialização do esqueleto (AE_E)

$$AE_{O(V)} = \frac{\sum O}{NO} = \frac{-0,235}{3} = -0,0783$$

$$AE_{E(V)} = \frac{\sum E}{NO} = \frac{0,118}{3} = 0,0393$$

Gênero: *Iryanthera* (I)

Metabólito especial

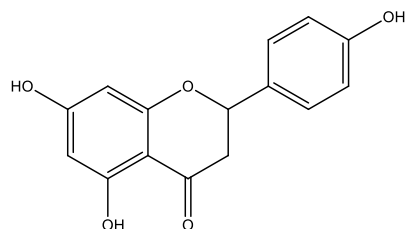


Engeletin (2)

Categoria molecular: diidroflavonol

$$NO_I = 3$$

Precursor do metabólito



Categoria molecular: flavanona

(naringenina)

Índices químicos particulares

$$x = 7; h = 8; n = 15; n = 21; q = 0; f = 0; c = 0; u = 6$$

Índices químicos moduladores	$IG = 1/4 = 0,25; IM = 0/4 = 0; IPt = 1/4 = 0,25; ID = 3/4 = 0,75$
Nível de oxidação (O) e nível de especialização do esqueleto (E)	$O_I = \frac{7 - 8}{15} = -0,0667$ $E_I = \frac{0 + 0 + 0 + 6}{21} = 0,286$
Parâmetros de avanço evolutivo de glicosilação (AE_G), de metilação (AE_M), de proteção total (AE_{Pt}) e desproteção (AE_D)	$AE_G = \frac{\sum G}{NO} = \frac{0,25}{3} = 0,833$ $AE_M = \frac{\sum M}{NO} = \frac{0}{3} = 0$ $AE_{Pt} = \frac{\sum Pt}{NO} = \frac{0,25}{3} = 0,833$ $AE_D = \frac{\sum D}{NO} = \frac{0,75}{3} = 0,25$
Parâmetros de avanço evolutivo de oxidação (AE_o) e de especialização do esqueleto (AE_E)	$AE_{O(I)} = \frac{\sum O}{NO} = \frac{-0,0667}{3} = -0,0222$ $AE_{E(I)} = \frac{\sum E}{NO} = \frac{0,286}{3} = 0,0953$

Se considerarmos a hipótese de que o metabólito tithonine seja o único presente no gênero *Virola* e Engeletin o único encontrado em *Iryanthera*, e assumirmos que esses sejam os únicos gêneros e metabólitos da via mista na família Myristicaceae, então dispomos dos dados necessários para a análise dos parâmetros quimiosistemáticos de toda a família, conforme ilustrado na Tabela 2S.

Tabela 2S. Análise quimiosistemática para a família Myristicaceae, considerando os dados quimiosistemáticos apresentados na Tabela 4

NO _{TotalMyristicaceae}	$NO_{total} = NO_V + NO_I$
	$NO_{total} = 3 + 3 = 6$
Índices químicos moduladores para a família Myristicaceae (My), referentes aos metabólitos da via mista: tithonine e engeletin	$AE_{G(My)} = \frac{IG_V + IG_I}{NO_{total}}$
	$AE_{G(My)} = \frac{0 + 0,25}{6} = 0,0417$
	$AE_{M(My)} = \frac{IM_V + IM_I}{NO_{total}}$
	$AE_{M(My)} = \frac{0,667 + 0}{6} = 0,111$
	$AE_{Pt(My)} = \frac{IPt_V + IPt_I}{NO_{total}}$
	$AE_{Pt(My)} = \frac{0,667 + 0,25}{6} = 0,153$
	$AE_{D(My)} = \frac{ID_V + ID_I}{NO_{total}}$
Parâmetro de avanço evolutivo de oxidação da família Myristicaceae (My), referentes aos metabólitos da via mista: tithonine e engeletin	$AE_{O(My)} = \frac{O_V + O_I}{NO_{total}}$
	$AE_{O(My)} = \frac{-0,235 + (-0,0667)}{6} = -0,0503$
Parâmetro de avanço evolutivo de especialização do esqueleto da família Myristicaceae, referentes aos metabólitos da via mista: tithonine e engeletin	$AE_{E(My)} = \frac{E_V + E_I}{NO_{total}}$
	$AE_{E(My)} = \frac{0,118 + 0,286}{6} = 0,0673$

A Tabela 2S demonstra como, a partir dos parâmetros quimiosistemáticos de cada micromolécula oriunda da via mista e dos dois gêneros da família Myristicaceae, *Virola* e *Iryanthera*, foi possível obter o resultado quimiosistemático geral para o táxon.