

# Análise exploratória por PCA de espectros de ressonância magnética nuclear de $^1\text{H}$ de óleos vegetais

Gustavo G. Shimamoto<sup>1</sup> (PG), Martha Maria A. Favaro<sup>1\*</sup> (PQ), Matthieu Tubino<sup>1</sup> (PQ)

Instituto de Química – UNICAMP, CP 6154, CEP 13083-970, Campinas-SP, Brasil. \*e-mail: martha@iqm.unicamp.br

Palavras Chave: óleos vegetais, ressonância magnética nuclear, Análise de Componentes Principais.

## Introdução

A técnica de ressonância magnética nuclear (RMN) é muito utilizada na Química Orgânica para a elucidação de compostos. Ela pode representar uma potencial ferramenta para a Química Analítica, visto que diversas propriedades dependem da estrutura dos compostos. Neste contexto, o presente trabalho apresenta uma análise exploratória a partir da Análise de Componentes Principais (PCA) realizada com espectros de RMN de hidrogênio (RMN  $^1\text{H}$ ) de 10 variedades de óleos vegetais. O objetivo dessa análise é o reconhecimento de similaridades entre as variedades de óleos, o que pode levar a semelhanças de suas propriedades físico-químicas, além disso, a PCA permite extrair informações importantes e não evidentes do conjunto de dados para sua melhor interpretação.

## Parte Experimental

Foram utilizados óleos vegetais de girassol, canola, soja, milho, castanha do Pará, algodão, arroz, gergelim e um óleo misto de gergelim com gergelim torrado. Para a obtenção dos espectros de RMN  $^1\text{H}$ , 20  $\mu\text{L}$  de cada óleo foram dissolvidos em 700  $\mu\text{L}$  de  $\text{CDCl}_3$  e os espectros (-4,00 a 16,00 ppm) foram obtidos no espectrômetro de RMN Bruker Avance III 500 MHz (frequência para  $^1\text{H}$ ). A PCA foi obtida com o programa computacional *Pirouette* 3.11, como pré-processamento os dados foram centrados na média.

## Resultados e Discussão

Para o conjunto de 20 amostras foram realizados estudos de PCA com o espectro de 0,4 a 6,5 ppm tendo sido realizada uma análise exploratória com cinco fatores e variância total de 98,06 %.

No gráfico de escores PC1  $\times$  PC2 (Figura 1) podem ser observados dois grupos que representam, respectivamente, amostras de óleos não refinados (A) e refinados (B). Uma segunda observação pode ser realizada dentro do grupo B, no qual a amostra de óleo de linhaça se encontra separada na PC1 das demais amostras deste grupo. Analisando o gráfico de *loadings* (Figura 2) é possível inferir que este comportamento está diretamente relacionado com a maior intensidade do pico referente aos prótons metílicos do ácido linolênico (0,97 ppm). Isto poderia indicar uma maior concentração de ácidos graxos livres nessa amostra.

Ao analisar a Figura 2, também pode ser observado um sinal intenso em 1,3 ppm que se refere aos hidrogênios da cadeia linear dos ésteres ( $-\text{CH}_2-$ ). Este sinal pode estar relacionado com a separação obtida para os grupos A e B, uma vez que óleos não refinados podem apresentar outros compostos que possuam hidrogênios com  $\delta$  nesta região.

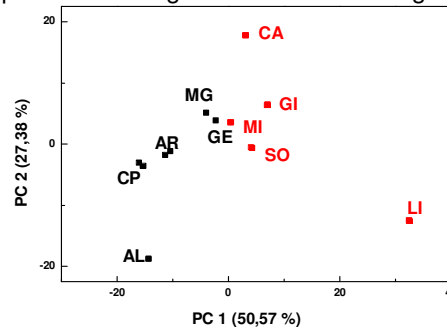


Figura 1. Gráfico de escores para PC2  $\times$  PC1. AL: óleo de algodão, AR: óleo de arroz, CA: óleo de canola, CP: óleo de castanha do Pará, GI: óleo de girassol, GE: óleo de gergelim, LI: óleo de linhaça, MG: óleo misto de gergelim e gergelim torrado, MI: óleo de milho, SO: óleo de soja.

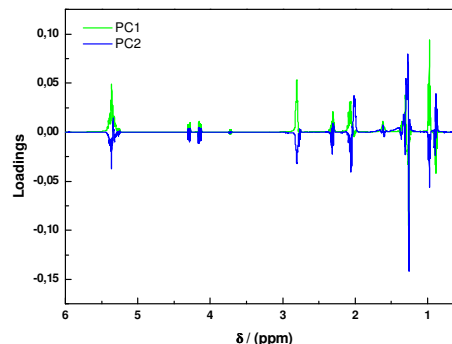


Figura 2. Gráfico de *loadings* dos espectros de RMN das amostras de óleos estudadas.

A RMN aliada a PCA indica a possibilidade de obter características relevantes para análise do controle de qualidade de óleos vegetais.

## Conclusões

A PCA gera perspectiva do desenvolvimento de um método de classificação a partir de RMN e quimiometria para diferenciação de óleos refinados e não refinados, dentre outras informações relacionadas com a estrutura dos compostos.

## Agradecimentos

Ao CNPq, pelo financiamento do projeto e ao IQ-UNICAMP à infraestrutura oferecida.