

Análise exploratória de extratos de duas espécies de carquejas do gênero *Baccharis* por FTIR e métodos quimiométricos.

Lucas Mariano da Cunha e Silva^{1,2} (PG) e Ieda Spacino Scarminio¹ (PQ). Imariano23@yahoo.com.br

¹Laboratório de Quimiometria em Ciências Naturais, Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, Caixa Postal 6001, Londrina, PR, Brasil. ²Grupo de Instrumentação e Automação, Instituto de Química, UNICAMP.

Palavras Chave: Carquejas, FTIR, métodos quimiométricos.

Introdução

Estudos que envolvem plantas medicinais quer seja na área etnobotânica, etnofarmacologia, farmacologia, farmacognosia, fitoquímica, agronomia ou biotecnologia e análise da qualidade, para que mereçam confiabilidade, devem partir da certeza de que as espécies envolvidas estejam corretamente classificadas e identificadas. Isto significa que estas áreas estão intimamente associadas com a taxonomia da planta. O estudo do espectro no infravermelho pode auxiliar uma pesquisa química de muitas maneiras, sendo que a mais poderosa é estabelecer com segurança a identidade de duas amostras que apresentam o mesmo espectro quando determinados da mesma maneira. Por outro lado, ligeiras diferenças no espectro pode não ser óbvia a olho nu. Com o avanço da tecnologia computacional, os métodos quimiométricos de análise exploratória como Análise de Componentes Principais (PCA) tornou-se uma ferramenta útil na comunidade científica propicia para análise mais rápida dos resultados. Este trabalho teve como objetivo explorar a influência de diferentes solventes extratores nas características composicionais dos extratos de duas espécies de carquejas do gênero *Baccharis* por FTIR e métodos quimiométricos.

Procedimento Experimental

A coleta de ambas espécies foi realizada em fevereiro de 2004. Partes aéreas das espécies *B. milleflora* (M) e *B. trimera* (T) na forma verde (15 g) foram trituradas por 5 minutos em um liquidificador antes de adicionar 100 mL do solvente ou mistura de solventes segundo um planejamento experimental Simplex-Centróide com 4 componentes, totalizando 15 misturas. Os pontos 1, 2, 3 e 4 do planejamento foram obtidos pelos solventes puros: 1 etanol, 2 acetato de etila, 3 diclorometano e 4 hexano. Pontos binários obtidos das misturas de volumes iguais dos solventes 1 e 2; 1 e 3; 1 e 4; 2 e 3; 2 e 4 e 3 e 4. Pontos ternários obtidos pela mistura de volumes iguais dos solventes 1, 2 e 3; 1, 2 e 4; 1, 3 e 4 e 2, 3 e 4. O ponto 15 obtido pela mistura de volumes iguais dos 4 solventes. Para a análise, 0,5 mg de cada extrato bruto foram misturadas com KBr, e os espectros registrados na região de 4000-400 cm⁻¹, usando um espectrômetro Shimadzu FTIR-8300.

Resultados e Discussão

29ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

O gráfico dos escores da CP1xCP2, está apresentado na Figura 1. Analisando esta Figura, observamos a formação de dois grupos, III e IV e duas amostras isoladas T4 (grupo I) e M7 (grupo II). A CP1 separa os grupos III e IV dos grupos I e II, enquanto que a CP2 discrimina os grupos I e II de III e IV. O grupo I está localizado na região menos negativa na CP2, enquanto que o grupo II está no lado oposto. Isto demonstra que existe diferença das amostras quanto ao solvente utilizado na extração. A amostra T4 é extraída somente no solvente hexano, a amostra M7 é uma mistura binária de etanol e hexano, o grupo III formado pela maioria dos extratos preparados em misturas binárias contendo etanol e o grupo IV pela maioria das amostras extraídas em acetato de etila puro ou em misturas. Logo o gráfico demonstra que houve uma separação de grupos. Estes grupos foram qualitativamente identificados por diferenciação de grupos funcionais.

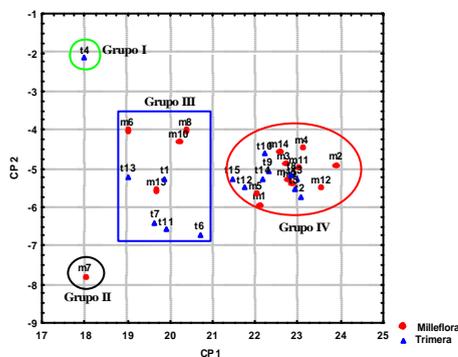


Figura 1 – Gráfico dos escores para as componentes CP1 e CP2.

Conclusões

As amostras foram classificadas em 4 grupos distintos. Existe uma região no espectro no IV discriminatória para os extratos estudados. Existe diferença na composição química das amostras com relação ao extrator. Foi possível traçar o perfil dos extratos, identificando qualitativamente os grupos funcionais responsáveis pela discriminação.

Agradecimentos

Proap/CAPES e Fundação Araucária.