

## Otimização da fase móvel na CLAE-FR para separação das substâncias químicas de extratos de *Baccharis milleflora*.

Lucas Mariano da Cunha e Silva<sup>1,2</sup> (PG) e Ieda Spacino Scarminio<sup>1</sup> (PQ). lucas@iqm.unicamp.br

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

Palavras Chave: *B. milleflora*, função resposta cromatográfica, quimiometria.

### Introdução

Na indústria, a análise química do material vegetal e/ou extratos da planta é muito importante no controle de qualidade. Após a identificação do material, inicia-se a investigação qualitativa e quantitativa. As técnicas analíticas normalmente usadas para o controle de qualidade de ervas medicinais são: cromatografia de camada delgada, CLAE, NIR, e CG-MS.

Em geral, as técnicas cromatográficas podem ser usadas para obter uma imagem relativamente completa de uma planta, comumente denominada impressão digital cromatográfica, onde a qualidade da planta ou extrato pode ser assegurada no caso dos ingredientes ativos não serem conhecidos ou serem muito complexos. A escolha certa da técnica de separação não é fácil, ela tem que ser feita combinando a complexidade do extrato com a quantidade dos compostos ativos esperados.

Este trabalho teve como objetivo comparar a eficiência de diferentes fases móveis na separação das substâncias químicas de diferentes extratos de *Baccharis milleflora* utilizando o fator de separação dos cromatogramas.

### Procedimento Experimental

Partes aéreas de *B. milleflora* 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 Centróide-Simplex com 4 componentes, totalizando 15 misturas.

A composição da fase móvel foi escolhida seguindo um planejamento experimental Centróide-Simplex com 3 componentes. As condições cromatográficas foram: coluna Metasil C18 ODS com dimensões de 250 mm x 4,6 mm, com partícula de 5 µm, temperatura de 50 °C volume de injeção de 20 µL, comprimento de onda de 210 nm e vazão de 1 mL/min. Os eluentes escolhidos foram: metanol 100% (MeOH), água:metanol:acetonitrila (70%:15%:15%) e acetonitrila 100% (ACN). As fases móveis foram 1 MeOH 100%; 2 ACN 100%; 3 H<sub>2</sub>O 100%; 4 MeOH/H<sub>2</sub>O 1:1; 5 MeOH/ACN 1:1; 6 ACN/H<sub>2</sub>O 1:1 e 7 MeOH/ACN/H<sub>2</sub>O 1:1:1.

### Resultados e Discussão

Para cada cromatograma os diversos valores do fator de separação entre picos adjacentes foram reduzidos a um único número pela função resposta cromatográfica dada pela equação:

$$FRC = \ln \sum_{i=1}^K (P_i)$$

Para a *B. milleflora* a composição da fase móvel que permitiu melhor separação foi a mistura metanol:água:acetonitrila na proporção 57,5%:35%:7,5% como pode ser visto na Figura 1, ponto 4. A FRC foi ajustada por um modelo cúbico especial. Os maiores valores de FRC são obtidos com a mistura etanol-acetato de etila-diclorometano, com a fase móvel metanol:água:acetonitrila na proporção 57,5%:35%:7,5%.

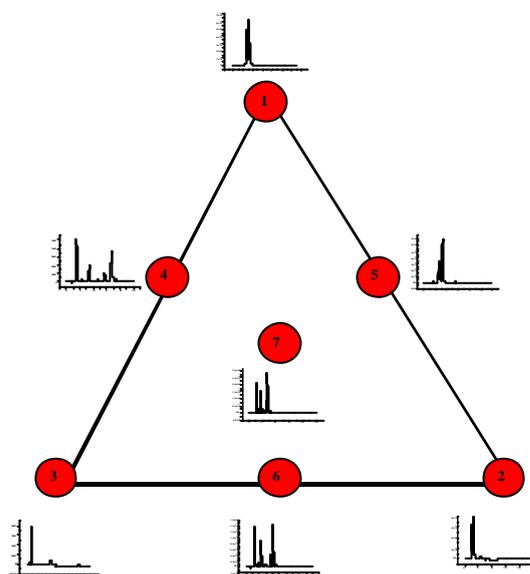


Figura 1 – Separação das substâncias químicas de um extrato, nas diferentes fases móveis.

### Conclusões

A fase móvel metanol:água:acetonitrila na proporção 57,5%:35%:7,5% apresentou melhor resposta para as amostras analisadas. A eficiência na separação depende da proporção água:metanol:acetonitrila.

### Agradecimentos

Proap/CAPES e Fundação Araucária.