

## Aplicação de métodos quimiométricos no estudo de antocianinas de diferentes espécies do gênero *hibiscus*.

Paulo Henrique Marçó\* (PG), Ronei J. Poppi (PQ) phmarco@iqm.unicamp.br

Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, Caixa Postal 6154, CEP 13083-970, Campinas – SP.

Palavras Chave: antocianinas, MCR, métodos quimiométricos.

### Introdução

O gênero *Hibiscus* é o maior da família Malvaceae, sendo constituído por cerca de 300 espécies. As antocianinas das espécies *Hibiscus Sabdariffa* L. e *Hibiscus Acetosella* são as mais conhecidas, sendo que já vêm sendo utilizadas como corante em alguns produtos alimentícios. Considerando a importância industrial das antocianinas destas espécies, este trabalho teve como objetivo investigar espectros na região UV-Vis com a aplicação de métodos quimiométricos. Foram utilizados métodos de Análise de Componentes Principais Multi-modo (MPCA) e Resolução de Curvas Multivariadas (MCR) com a utilização de diferentes métodos de estimativas iniciais.

### Resultados e Discussão

O experimento foi realizado variando-se o pH de 2,0 a 12,5. A primeira análise realizada foi a Análise de Componentes Principais (PCA). Em seguida, aplicou-se o MPCA para verificação da similaridade entre os dados. Observou-se que para o *Hibiscus Sabdariffa* L., a MPCA distingue 6 grupos: as matrizes referentes ao meio ácido são separadas das neutras e alcalinas, como mostra a Figura 1.

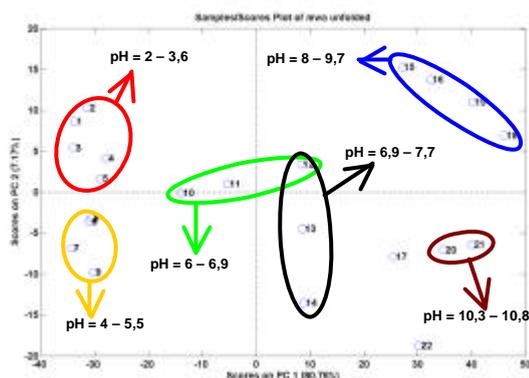


Figura 1. MPCA para matrizes compostas por espectros de antocianinas do *Hibiscus Sabdariffa* L.

Para o *Hibiscus Acetosella* (Figura 2) observou-se a presença de 4 grupos diferentes com a utilização do MPCA. A partir da aplicação de MCR, com estimativas iniciais realizadas por PURE (seleção de variáveis mais puras baseadas no método

SIMPLISMA) e EFA (Evolving Factors Analysis), foi possível obter diferentes perfis espectrais e seus respectivos perfis cinéticos.

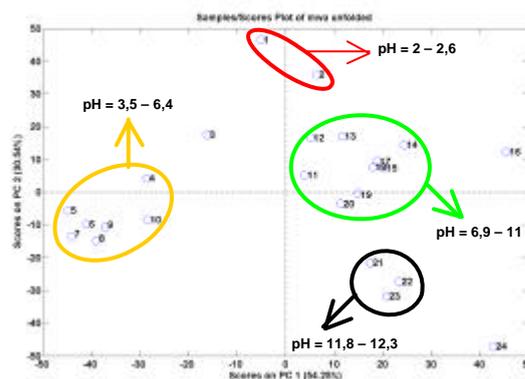


Figura 2. MPCA para matrizes compostas por espectros de antocianinas do *Hibiscus Acetosella*.

A Figura 3 apresenta a concentração relativa e o perfil espectral, obtidos a partir da matriz em pH 5 para o *Hibiscus Sabdariffa* L. com aplicação de MCR com estimativa inicial por PURE e EFA, respectivamente. A Figura 4 apresenta, da mesma forma que a figura anterior, dados obtidos da matriz em pH 5 para *Hibiscus Acetosella*.

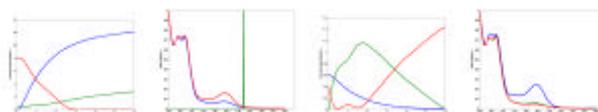


Figura 3. Perfil cinético e espectral para uma matriz de *H. Sabdariffa* L. com estimativa PURE e EFA.

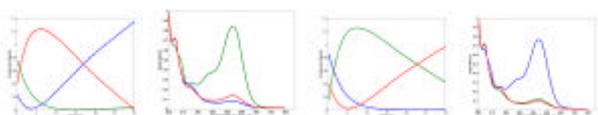


Figura 4. Perfil cinético e espectral para uma matriz de *H. Acetosella* com estimativa PURE e EFA.

### Conclusões

O trabalho desenvolvido demonstrou que a aplicação de métodos quimiométricos associados aos dados espectrais pode fornecer informações muito úteis para a diferenciação entre as espécies de flores de Hibisco estudadas.

### Agradecimentos

*Sociedade Brasileira de Química ( SBQ)*

Este trabalho teve o apoio financeiro da Fapesp  
(processo nº 04/09231-6).