

# Uso de componentes principais com e sem rotação varimax na otimização de misturas extratoras de material vegetal

Ieda Spacino Scarminio<sup>1</sup> (PQ), Patricia Kaori Soares<sup>2</sup> (PG) e Roy Edward Bruns<sup>2</sup> (PQ)  
[pattyks@iqm.unicamp.br](mailto:pattyks@iqm.unicamp.br)

1) Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, CP 6001, 86051-990, Londrina, PR, Brasil.

2) Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, CP 6154, 13083-970, Campinas, SP, Brasil.

Palavras Chave: planejamento experimental centróide simplex, modelagem de misturas, análise de componentes principais, *Erythrina speciosa*, rotação varimax

## Introdução

Otimização de técnicas de extração é importante em várias aplicações comerciais e farmacêuticas. Uma estratégia eficiente para extrair compostos de interesse com o mínimo de impureza e materiais co-extraídos consiste em planejamentos estatísticos de misturas e análise de superfícies de resposta. Cromatogramas transformados por análise de componentes principais com e sem varimax foram investigados construindo modelos de misturas para otimização de extração seletiva de compostos da folha da *Erythrina speciosa* Andrews.

## Experimental

Os extratos de *Erythrina speciosa* foram preparados pesando-se 2,000g de folhas secas e adicionando-se 30 mL do solvente extrator conforme um planejamento experimental Centróide-Simplex<sup>1</sup> axial com 4 componentes, 1 etanol, 2 diclorometano, 3 hexano e 4 acetona, totalizando 15 diferentes composições de solventes. Para as análises por CLAE, 50µL do extrato filtrado foram diluídos em 950µL da fase móvel metanol:água (80:20 v/v). 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.

## Resultados e Discussão

Os cromatogramas na forma digital (1407 valores de alturas de picos no intervalo de 15 min) foram submetidos à ACP com e sem rotação varimax. O gráfico dos escores das três primeiras componentes principais (CP) sem rotação varimax explicaram 89,13% da variação dos dados enquanto que com rotação varimax (fator) a variância explicada foi de 87,67%. Nos dois casos foram observadas a formação de 5 grupos, separados basicamente por três regiões, caracterizadas pelos picos em 1,7, 3,1 e 6,6 minutos. Os escores foram usados para determinar superfícies de resposta úteis para otimizar extrações seletivas.

Os loadings das 6 primeiras CP e fatores varimax podem ser visualizados na Figura 1.

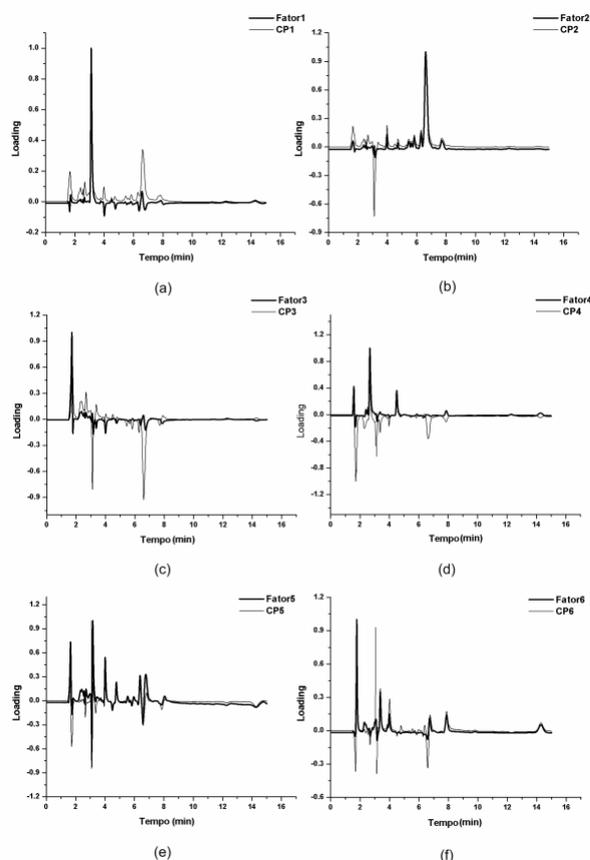


Figura 1 – Loadings das 6 primeiras componentes principais obtidas pela análise de componentes principais com e sem rotação varimax.

## Conclusões

Os loadings dos fatores varimax apresentaram estruturas e modelos de misturas mais simples que da análise de componentes principais, facilitando a extração seletiva de compostos de material vegetal.

## Agradecimentos

CNPq, Fapesp e Fundação Araucária

<sup>1</sup> Bruns, R. E., Scarminio, I. S. e Neto, B. B. Statistical Design – Chemometrics, Elsevier, Amsterdam, 2006.

