

Tratamento quimiométrico e análise exploratória de perfis cromatográficos de extratos aquosos de espécies de *Phyllanthus*

Lúcia R.R.Martins(PG)^{1*}, Edenír R. Pereira-Filho(PQ)¹, Quezia B. Cass(PQ)¹ – luadoc@yahoo.com.br

¹Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, caixa postal 676, CEP 13565-905, São Carlos/SP.

Palavras Chave: perfil cromatográfico, CLAE, Análise de Componentes Principais, *Phyllanthus*, alinhamento de picos.

Introdução

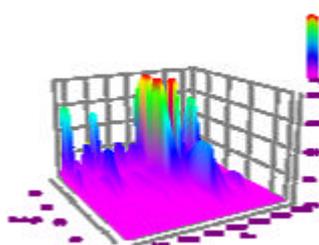
A crescente comercialização de produtos fitoterápicos tem tornado imprescindível o estabelecimento de critérios químicos de qualidade e o desenvolvimento de métodos analíticos que assegurem a autenticidade de matérias-primas vegetais¹.

Espécies do gênero *Phyllanthus* são amplamente disseminadas no Brasil e comumente conhecidas como “quebra-pedra”, sendo utilizadas para o tratamento de infecções urinárias e cálculos renais. A Farmacopéia Brasileira reconhece oficialmente a atividade terapêutica de apenas duas espécies: *P.niruri* e *P.tenellus*. Outras espécies são igualmente encontradas e utilizadas no Brasil e podem ser facilmente confundidas com as oficiais, devido a suas semelhanças morfológicas.

Este trabalho propõe um método analítico qualitativo por Cromatografia Líquida de Alta Eficiência, com o qual foram obtidos perfis químicos de seis espécies de *Phyllanthus*. Os cromatogramas obtidos foram submetidos a diferentes tipos de alinhamento de bandas cromatográficas e, em seguida, fez-se a análise exploratória (PCA) dos mesmos, a partir da qual foi possível estabelecer um padrão comparativo para avaliação de amostras comerciais.

Resultados e Discussão

Extratos aquosos liofilizados de seis espécies de *Phyllanthus* foram dissolvidos em água (30 mg/mL) e analisados utilizando as seguintes condições cromatográficas: coluna analítica Hexil-fenil Luna[®] 10 μ m (15x0,46cm d.i.), vazão 0,5 mL/min; volume de injeção 10 μ L; eluição gradiente linear no modo reverso (MeOH:ácido fosfórico 0,1%(v/v)): 5-100% MeOH em 50 min ($\Delta\%B = 1,90$); isocrático em 100% MeOH por 20 min. Os cromatogramas foram adquiridos utilizando detector de arranjo de diodos, com varredura entre 190-600nm (Fig. 1).



31ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Fig.1. Perfil cromatográfico obtido por CLAE-DAD.

Para as análises quimiométricas, foi selecionado apenas um comprimento de onda (275nm) para cada cromatograma, cujos valores numéricos foram

organizados em uma matriz de dados contendo 130 linhas (amostras) e 4675 variáveis (tempos de retenção). Os cromatogramas foram alinhados com um algoritmo de otimização², aplicado na matriz de dados através do software Matlab[®] versão 6.5 (MathWorks). Após esse procedimento, fez-se análise exploratória dos dados, utilizando Análise de Componentes Principais (PCA) e Análise de Agrupamentos Hierárquicos (HCA), contidos no software Pirouette[®] versão 4.0 (Infometrix) (Fig.2).

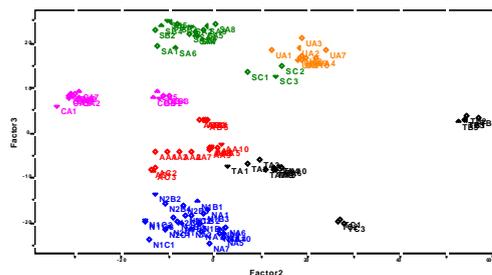


Fig.2. Análise exploratória (PCA) das amostras analisadas (PC2 x PC3).

Modelos de classificação foram propostos, utilizando SIMCA (Soft Independent Modeling of Class Analogy) (Fig.3), KNN (K-Nearest Neighbor) e PLS-DA (Partial Least Squares Discriminant Analysis) e aplicados para avaliação de amostras comerciais de chás e cápsulas de “quebra-pedra”.

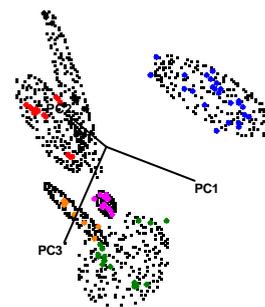


Fig.3. Modelo SIMCA.

Conclusões

O estudo realizado permitiu verificar a importância do alinhamento de dados cromatográficos e seu efeito sobre a análise exploratória e modelagem para classificação de amostras a partir do perfil cromatográfico. O método desenvolvido e os modelos de classificação demonstraram ser aplicáveis para o controle de qualidade químico e para a verificação de autenticidade de produtos de origem vegetal comercialmente disponíveis.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CPQBA/UNICAMP (Dra. Glyn M. Figueira) pelas amostras vegetais concedidas e aos órgãos de fomento: CAPES, CNPq e FAPESP, pelo suporte financeiro.

¹ Xie, P. et al.; *J. Chromatography A*, 1112 (2006), 171-180.

²Disponível em: <http://www.models.kvl.dk>.