Planejamento estatístico de mistura para avaliação do rendimento do extrato bruto e das frações das folhas de *Erythrina speciosa* Andrews.

Patrícia K. Soares¹ (PG), leda S. Scarminio² (PQ) e Roy E. Bruns¹ (PQ) pattyks@igm.unicamp.br

1) Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, CP 6154, 13083-970, Campinas, SP, Brasil. 2)Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, CP 6001, 86051-990, Londrina, PR, Brasil.

Palavras Chave: Planejamento e otimização de experimentos, superfície de resposta, Erythrina speciosa Andrews.

Introdução

Este trabalho teve como objetivo otimizar o processo de extração, variando o solvente extrator com base num planejamento estatístico de misturas¹, proceder um fracionamento desses extratos e avaliar o rendimento dos extratos brutos e das diferentes frações obtidas através da metodologia de superfícies de resposta.

Resultados e Discussão

Os extratos brutos de *Erythrina speciosa* foram preparados pesando-se 15,000g de folhas secas e adicionando-se 120 mL (5 vezes) do solvente extrator de acordo com as composições do planejamento experimental centróide simplex¹ com 4 componentes, etanol, diclorometano, hexano e acetona, totalizando 15 diferentes composições de solventes. Após atingir peso constante, os extratos brutos foram submetidos a um fracionamento gerando fibras e mais três frações, neutra, orgânica e básica.

A metodologia de superfície de resposta que consiste na modelagem pela aplicação de modelos simples às respostas obtidas com os experimentos do planejamento de misturas foi aplicada aos rendimentos obtidos do extrato bruto, das fibras, das frações e dos "resíduos do fracionamento". Estes foram obtidos através do cálculo da diferença da massa de extrato bruto com a soma de todas as massas das outras frações. O erro padrão foi estimado pelo erro experimental determinado por cinco replicatas no ponto central.

A todos os 6 conjuntos de dados foram aplicados os modelos linear, quadrático e cúbico especial, que foram avaliados pela análise da variância. Para os rendimentos do extrato bruto, todos os modelos, apesar de significativos, apresentaram falta de ajuste. Para os demais, o melhor ajuste foi com o modelo cúbico especial, exceto para a fração orgânica, que foi mais bem ajustada ao modelo quadrático.

A equação para o modelo cúbico especial aplicado aos rendimentos obtidos da fração neutra está mostrada abaixo, somente com os termos significativos no nível de 95% de confiança:

FN = 0,2420e + 0,2932d + 0,0969h + 0,3166a $(\pm 0,0294)(\pm 0,0294)(\pm 0,0294)(\pm 0,0294)$

+ **0,4233**ed + **0,7871**eh + **0,4283**dh + **2,5875**eda (±0,1431) (±0,1431) (±0,1431) (±0,8980)

onde e = etanol, d = diclorometano, h = hexano e a = acetona e os valores entre parênteses representam o erro padrão de cada coeficiente. A ANOVA para estes dados, bem como a distribuição dos resíduos se mostrou satisfatória.

A equação mostra que os coeficientes mais importantes no nível de 95% de confiança são: o de interação binário entre os solventes e e h e o de interação cúbico entre os solventes e, d e a, sendo que ambos interagem sinergicamente. As curvas de níveis para este modelo podem ser vistas na Figura 1, onde o componente h foi igualado a zero para representar a superfície em apenas duas dimensões.

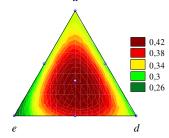


Figura 1: Superfície de resposta para os componentes; *e*, *d* e *a*, aplicada ao rendimento da fração neutra.

Conclusões

Pela análise visual da superfície de resposta, vimos que o máximo ficou em torno do ponto central, e que para aumentar o rendimento da fração neutra o melhor solvente seria uma mistura entre etanol, diclorometano e acetona na proporção de 1:1:1, a equação prevê um rendimento de 0,4541g, que está em ótima concordância com o valor experimental de 0,4352g.

Agradecimentos

CNPq, Fapesp e Fundação Araucária

¹ Soares, P. K., Bruns, R. E. e Scarminio, I. S., Anal. Chimi. Acta, 2008, 613, 48-55.