

Aplicação de Resolução Multivariada de Curvas utilizando-se matrizes aumentadas no estudo da influência da radiação UV em antocianinas.

Paulo Henrique Março* (PG), Werickson Fortunato de Carvalho Rocha (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: Quimiometria, MCR-ALS, Matrizes aumentadas, Antocianina, Corantes Naturais, *Hibiscus acetosella*.

Introdução

Atualmente as amostras apresentam-se cada vez mais complexas e freqüentemente contém muitas espécies a serem analisadas simultaneamente. A necessidade de uma instrumentação mais complexa para fazer face a estes sistemas de forma eficiente exige, da mesma forma, ferramentas computacionais para manipular e interpretar as informações obtidas. Uma dessas ferramentas é a Resolução de Curvas Multivariadas (MCR), que é um método utilizado para a obtenção dos valores de concentração das amostras, assim como os espectros puros dos componentes dentro da amostra, a partir de uma matriz de dados que contém as variáveis analíticas. A análise de dados por MCR pode ser realizada sobre matrizes aumentadas, que podem ser definidas como uma forma de junção entre duas ou mais matrizes de dados bilineares de sistemas diferentes, que partilham de alguns ou de todos os seus compostos em uma terceira direção, que representa a diferença qualitativa ou quantitativa entre as amostras.

Uma característica marcante das antocianinas está no fato de que em soluções aquosas, elas apresentam diferentes estruturas em função do pH e da incidência de luz. Estas espécies podem ser utilizadas como corante em alguns produtos alimentícios. No entanto a estabilidade destes pigmentos é facilmente influenciada por fatores como luz, pH, etc. Considerando a importância industrial das antocianinas, este trabalho tem como objetivo investigar o comportamento das antocianinas do gênero *Hibiscus acetosella* em diferentes valores de pH, com e sem exposição a radiação UV utilizando-se a Resolução Multivariada de Curvas com Mínimos Quadrados Alternados (MCR-ALS) utilizando-se matrizes aumentadas.

Resultados e Discussão

O experimento foi realizado variando-se o pH de 1,9 a 12,7 com e sem exposição da amostra à radiação UV. A aplicação de MCR-ALS nos dados da amostra sem exposição à radiação UV, possibilitou a detecção de 7 possíveis espécies, enquanto que para a amostra exposta foram detectadas 9. Neste caso, a maior vantagem de se aplicar a estratégia

das matrizes aumentadas está na possibilidade em detectar quais espécies são comuns em diferentes valores de pH, e como estas espécies evoluem em diferentes valores de pH, além de facilitar a observação do efeito da exposição à radiação UV. A Figura 1 apresenta (a) os espectros e (b) sua respectiva evolução com o tempo e pH recuperados pela aplicação de MCR-ALS nos dados referentes a amostra analisada no escuro. A Figura 2 apresenta (a) os espectros e (b) as respectivas evoluções com o tempo e pH recuperados pela aplicação de MCR-ALS nos dados referentes a amostra analisada sob radiação UV.

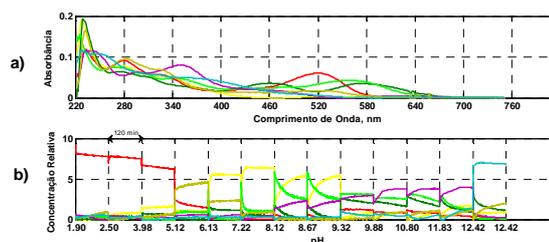


Figura 1. (a) Espectros e (b) respectiva evolução com o tempo e pH recuperados pela aplicação de MCR-ALS nos dados referentes a amostra de *Hibiscus acetosella* analisada no escuro.

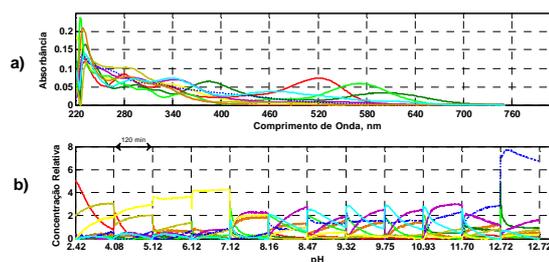


Figura 2. (a) Espectros e (b) respectiva evolução com o tempo e pH recuperados pela aplicação de MCR-ALS nos dados referentes a amostra de *Hibiscus acetosella* analisada sob radiação UV

Conclusões

Os resultados mostram que a radiação acelera a degradação das antocianinas que apresentam cor, antecipando o surgimento de espécies para valores de pH onde as mesmas não são observadas quando a amostra não é exposta a radiação UV.

Agradecimentos

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