

Discriminação dos espectros UV-vis dos cromatogramas dos extratos de *B. variegata* L. preparados com base num planejamento centróide simplex modificado.

Patrícia K. Soares¹ (PG)*, Fernanda Delaroza² (PG), Ieda S. Scarminio² (PQ) e Roy E. Bruns¹ (PQ)
pattyks@iqm.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: análise de componentes principais, HPLC-DAD, *Bauhinia variegata* L., planejamento experimental.

Introdução

Este trabalho teve como objetivo discriminar os espectros UV-vis obtidos de cada pico dos cromatogramas dos extratos de *Bauhinia variegata* L. preparados com base em um planejamento centróide simplex modificado, Figura 1.

Resultados e Discussão

Os extratos brutos de *B. variegata* foram preparados pesando-se 3,000g de folhas secas e trituradas e adicionando-se 60 mL (5 vezes) do solvente extrator de acordo com as composições do planejamento experimental centróide simplex modificado¹ com 3 componentes, diclorometano, etanol e acetona, totalizando 10 misturas diferentes, Tabela 1.

Tabela 1. Composição do solvente extrator, siglas e número de espectros obtidos do cromatograma.

Extrato	Solventes			Sigla	Nº espectros
	Dic.	Eta.	Ace.		
1	1	0	0	d	9
2	0	1	0	e	9
3	0		1	a	15
4	1/2	1/2	0	de	10
5	0	1/2	1/2	ea	13
6	1/2	0	1/2	da	10
7	1/3	1/3	1/3	dea	14
8	2/3	1/6	1/6	Dea	11
9	1/6	2/3	1/6	dEa	9
10	1/6	1/6	2/3	deA	16

As condições cromatográficas foram: coluna Metachem C18 ODS 0380 (250 mm x 4,6 mm, 5 µm), fase móvel metanol:água (77:33 v/v), vazão de 1 mL/min, temperatura de 50°C, volume de injeção de 20 µL, comprimento de onda de 210 nm e tempo de retenção de 30 min.

Os espectros correspondentes aos picos dos cromatogramas dos 10 extratos foram colocados numa matriz formada por 116 amostras (espectros) e 100 variáveis, correspondentes à faixa de 200 a 322 nm. Primeiramente essa matriz foi normalizada, suavizada e autoescalada e em seguida submetida à análise de componentes principais. Com seis componentes principais foi possível explicar 99,74% da variância dos dados. A Figura 1 mostra o gráfico

dos escores das duas primeiras componentes principais, que juntas, explicam 91,85% da variância dos dados. Neste gráfico, é possível ver a discriminação de 13 grupos.

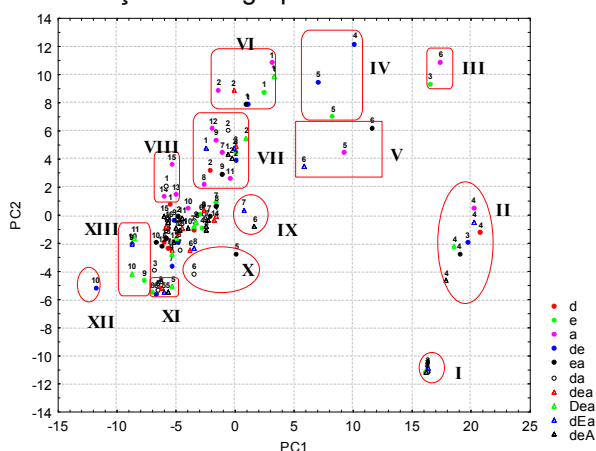


Figura 1. Gráfico dos escores da CP1 com CP2.

Analisando os loadings e também as projeções dos escores das outras componentes principais foi possível discriminar 23 grupos de espectros.

Conclusões

Através dos resultados obtidos vimos que, com o auxílio da análise de componentes principais foi possível separar os 116 espectros em 23 grupos distintos. Isso auxilia na comparação de picos provenientes de extratos da mesma planta preparados em solventes diferentes, para escolher o solvente extrator mais adequado. Permite saber se picos com mesmo tempo de retenção são da mesma substância ou grupo de substâncias. Pode auxiliar ainda na etapa de identificação de picos quando houver disponibilidade de padrões.

Agradecimentos

CNPq, Fapesp e Fundação Araucária

¹ R. E. Bruns, B. Barros Neto, I. S. Scarminio: Statistical Design - Chemometrics. Elsevier, Amsterdam, 2006.