

## Aplicação de Resolução Multivariada de Curvas (MCR-ALS) em GCxGC-FID para Quantificação de Óleo Essencial de Alecrim

Luiz Antonio F. de Godoy Jr. (PG)\*, Leandro W. Hantao (PG), Ernesto C. Ferreira (PG), Marcio P. Pedroso (PQ), Fabio Augusto (PQ), Ronei Jesus Poppi (PQ).

lajunior@iqm.unicamp.br

Instituto de Química, UNICAMP, Cx. Postal: 6154, CEP: 13083-970, Campinas-SP.

Palavras Chave: GCxGC, MCR, alecrim.

### Introdução

O método de Resolução Multivariada de Curvas (MCR) foi desenvolvido pelo prof. Romà Tauler em 1995<sup>1</sup>. O MCR decompõe o conjunto de dados de acordo com a equação:

$$D = CS^T + E$$

onde **D** é a matriz de dados obtidas experimentalmente, a matriz **C** é geralmente associada com perfis de concentração, **S** é a matriz com perfis puros recuperados para componente e **E** é a matriz de resíduos. Deste modo, além de realizar a quantificação da(s) espécie(s) de interesse o MCR recupera os perfis experimentais de cada espécie. O modelo é ajustado utilizando-se Mínimos Quadrados Alternantes (ALS), que iterativamente ajusta as matrizes **C** e **S** ao conjunto de dados **D**.

Até o momento, não há trabalhos na literatura relatando o uso de MCR-ALS em dados obtidos por cromatografia gasosa bidimensional abrangente (GCxGC-FID). Deste modo, o objetivo deste trabalho foi a utilização de MCR-ALS em dados de GCxGC-FID para quantificação de óleo essencial de alecrim.

### Resultados e Discussão

O Conjunto de colunas utilizado no GCxGC-FID foi HP-5(30m<sub>x</sub>0,25mm<sub>x</sub>0,25µm) como primeira dimensão e SPWax (1,0m<sub>x</sub>0,1mm<sub>x</sub>0,1µm) na segunda dimensão.

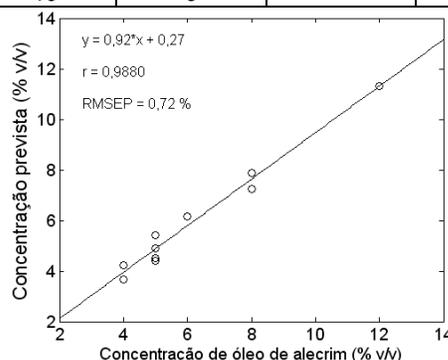
MCR-ALS foi utilizado na quantificação de óleo essencial de alecrim através de GCxGC-FID. Para isso, construiu-se uma curva de calibração de óleo de alecrim a 2,5, 5,0, 7,5, 10,0 e 15,0 % v/v em álcool de cereais. Construiu-se um conjunto de 10 amostras de validação utilizando como interferentes óleo essencial de abacaxi e uma marca de perfume comercial (tabela 1).

Para construção do modelo os cromatogramas foram “desdobrados” e as regiões referentes ao solvente (álcool) e ao propilenoglicol não foram utilizadas, pois apresentaram alargamento excessivo na segunda coluna. O MCR-ALS foi utilizado com as restrições de não-negatividade para concentração e cromatogramas e como estimativa

inicial utilizou-se os cromatogramas dos componentes puros.

**Tabela 1.** Composição das amostras de validação em % v/v.

Amostra	Alecrim	Abacaxi	Perfume
1	8	-	-
2	12	-	-
3	5	2	-
4	4	4	-
5	5	10	-
6	5	6	-
7	8	4	-
8	5	-	95
9	4	-	6
10	6	-	80



**Figura 1.** Gráfico dos valores de óleo de alecrim de referência vs. previstos pelo modelo para as amostras de validação.

Como pode ser visto na figura 1 as previsões de concentração para o óleo de alecrim pelo modelo MCR-ALS apresentaram valores concordantes com a quantidade presente nas amostras. Os perfis recuperados apresentaram boa concordância com os cromatogramas dos componentes puros.

### Conclusões

O método de Resolução Multivariada de Curvas (MCR) foi utilizado com sucesso na construção do modelo de calibração para óleo essencial de alecrim, sendo, portanto este o primeiro relato de uso de MCR em dados obtidos por GCxGC-FID.

### Agradecimentos

CNPq, FAPESP

<sup>1</sup> Tauler, R.; Smilde, A.; Kowalski, B. J. *Chemom.* 1995, 9, 31.