

# Espectrometria de Massas com Ionização Electrospray aliada a calibração multivariada para estudo de adulteração de azeite oliva por óleo de canola

Paulo Sérgio Pimenta Alves<sup>1</sup> (IC)\*, Júnia de Oliveira Alves<sup>2</sup> (PG), Rodinei Augusti<sup>2</sup> (PQ), Waldomiro Borges Neto<sup>1</sup> (PQ).  
\*paulopimenta1989@hotmail.com

<sup>1</sup> Laboratório de Quimiometria do Triângulo, Instituto de Química, Universidade Federal de Uberlândia, MG

<sup>2</sup> Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais, MG

Palavras Chave: ESI-MS, oliva, canola, PLS.

## Introdução

Devido ao alto valor agregado do azeite de oliva extra virgem e sua produção limitada, a tentativa de adulteração deste com óleos vegetais de menor valor comercial vem se tornando uma causa de prejuízos para o consumidor e danos a sua saúde.

A Espectrometria de Massas com Ionização Electrospray (ESI-MS), devida à capacidade de detectar e identificar compostos químicos de amostras complexas com elevada rapidez de análise, conquista a cada dia um papel importante na análise alimentar. Dado ao grande número de informações contidas nos espectros, a quimiometria pode ser uma importante ferramenta para extrair informação relevante. Este trabalho apresenta uma metodologia envolvendo a técnica ESI-MS em conjunto com o método de Quadrados Mínimos Parciais (PLS), tendo em vista a quantificação da concentração de óleo de canola em azeite de oliva extra virgem.

## Resultados e Discussão

Foram medidos os espectros ESI-MS de 40 amostras com concentrações variando de 0,5 a 20% (m/m) de óleo de canola em oliva extra virgem. A partir dos espectros de massas no modo positivo obtidos em um espectrômetro de massas LCQFleet, da marca ThermoScientific foi construído um modelo de calibração por PLS. Na construção do modelo foram usadas 30 amostras no conjunto de calibração, restando 10 que foram usadas para a previsão. Os parâmetros de eficiência do modelo são apresentados na Tabela 1.

Tabela 1. Parâmetros do modelo PLS.

VL	RMSEC	RMSEP	Erro Médio (%)
7	0,2432	0,4002	3,5552

Observa-se na tabela que o modelo apresentou erros satisfatórios.

Na Figura 1 apresentamos o gráfico contendo os valores de concentrações reais versus os valores previstos pelo modelo de calibração, mostrando linearidade na faixa de trabalho.

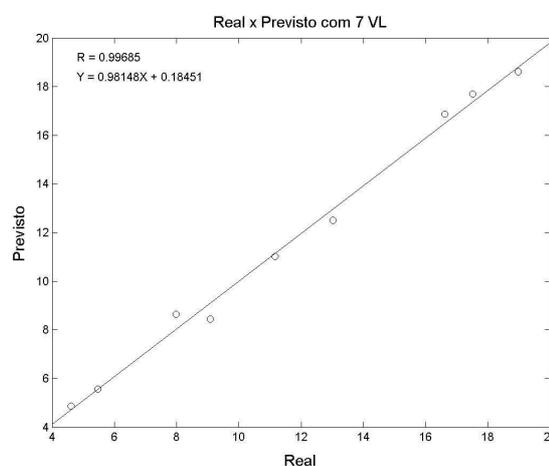


Figura 1. Gráfico das concentrações reais x previstas.

## Conclusões

Apesar da grande semelhança entre a composição química dos óleos vegetais, o modelo PLS desenvolvido usando espectros ESI-MS no modo positivo foi capaz de prever satisfatoriamente as concentrações de óleo de canola adicionadas ao azeite de oliva extra virgem. A metodologia desenvolvida representa uma viável alternativa para o controle de qualidade de azeites comercializados.

## Agradecimentos

CAPES; CNPq; FAPEMIG