

Aplicação de MCR-ALS em dados SPME-GC-qMS de substâncias voláteis liberadas por algas após incidência de radiação UV.

^aPaulo Henrique Março (PQ)*, ^aLeandro Wang Hantao (PG), ^bMônica Regina Piovani (PG), ^bTelma Teixeira Franco (PQ), ^bEduardo Jacob-Lopes (PQ), ^aFábio Augusto (PQ).
*paulohmarco@iqm.unicamp.br

^aDepartamento de Química Analítica - Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, Caixa Postal 6154, CEP 13083-970, Campinas – SP.

^bDepartamento de Processos Químicos - Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Caixa Postal 6066, CEP 13083-970, Campinas – SP.

Palavras Chave: MCR-ALS, GC-qMS, bioreator.

Introdução

O monitoramento de espécies voláteis presentes em plantas pode ser utilizado para acompanhar a evolução da reação química ao longo do tempo. Conseqüentemente, informações a respeito da cinética da reação, consumo/degradação e/ou formação de entidades químicas poderão ser utilizadas para desvendar eventuais problemas associados a ciclos/mecanismos bioquímicos. Para estudar estes sistemas, foram feitas amostragens “on-site” da fração volátil produzida por microorganismos em um bioreator utilizando-se a microextração em fase sólida (SPME). As amostragens foram realizadas imediatamente após o inóculo dos microorganismos reservatório do reator e após períodos de 4, 21, 30, 45 e 53 horas. As amostras foram injetadas no cromatógrafo a gás acoplado a um espectrômetro de massas com analisador quadrupolar (GC-qMS). Em seguida, as matrizes de dados foram reordenadas e alinhadas para aplicação de MCR-ALS.

Resultados e Discussão

Após o alinhamento dos cromatogramas, fez-se uma decomposição em valores singulares (SVD) para a indicação do número de cromatogramas diferentes dentro da matriz, e em seguida, fez-se uma estimativa dos perfis cromatográficos e suas respectivas concentrações utilizando-se o método de Resolução Multivariada de Curvas com os Mínimos Quadrados Alternados (MCR-ALS). A decomposição em valores singulares sugere a presença de 4 cromatogramas diferentes com 99,56% de variância explicada e falta de ajuste de 6,62%. A **Figura 1 [a), b), (c) e (d)]** apresenta os cromatogramas assim como suas concentrações relativas, obtidas por MCR-ALS. Os resultados de MCR-ALS sugerem que durante as primeiras 21 horas de exposição, são liberados exatamente os mesmos compostos voláteis (**Figura 1 - a**). Após 30 horas, o perfil cromatográfico começa a apresentar algumas alterações significativas, indicando o surgimento e desaparecimento de espécies,

originando o cromatograma apresentado na **Figura 1 - (b)**. O cromatograma obtido pela amostragem realizada após 30 horas de exposição à radiação ultravioleta apresenta diferenças significativas com relação ao cromatograma obtido após 45 horas de análise, como mostra o cromatograma ilustrado na **Figura 1 - (c)**. Após mais 8 horas de exposição (53 horas de exposição) a amostra apresentou o cromatograma da **Figura 1 (d)**.

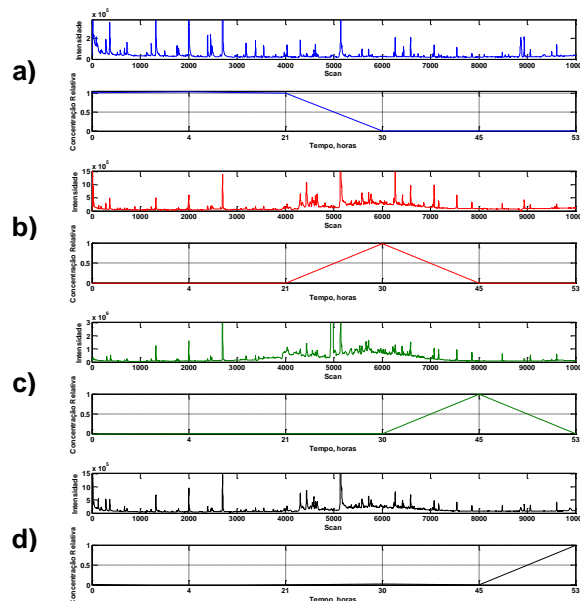


Figura 1. Cromatogramas de fração volátil do bioreator obtidos por MCR-ALS

Conclusões

A combinação entre SPME-GC-qMS com MCR-ALS para monitoramento de dados evolutivos proporcionou a extração de cromatogramas virtuais, cujos picos representam entidades sendo consumidas e produzidas com grande precisão. Os resultados deste trabalho podem contribuir para o estudo e monitoramento de espécies voláteis de várias substâncias.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPESP e Petrobrás