

Identificação de substâncias aromáticas puras ou em formulação por espectrofluorimetria e quimiometria

Cristina M. Quintella¹(PQ), Marilena Meira¹(PQ), Edna Maura P. de Araujo¹ (PG), Juceni P. David^{1*} (PQ)

¹ LPPN, Faculdade de Farmácia, Universidade Federal da Bahia, Av. Barão de Jeremoabo s/n. Campus de Ondina, Salvador, BA, Brasil, CEP: 40.170-290.

² LabLaser, Instituto de Química, Universidade Federal da Bahia, Av. Barão de Jeremoabo s/n. Campus de Ondina, Salvador, BA, Brasil, CEP: 40.170-290.

Palavras Chave: identificação de substâncias puras, espectrofluorimetria, quimiometria

Introdução

O presente trabalho trata de um método para identificação de substâncias aromáticas puras ou em formulação através da comparação de seus espectros com os de substâncias padrões por aplicação de técnicas de análises multivariadas, tal como, a Análise de Componentes Principais como modelo matemático. O método tem potencial aplicação na identificação de substâncias isoladas de produtos naturais, resultantes de síntese, drogas ilícitas ou medicamentos.

Resultados e Discussão

Neste trabalho foi utilizada a espectrofluorimetria como técnica analítica para análise de 5 substâncias puras: 6 amostras de ácido caféico (1), 6 amostras de ácido ferúlico (2), 6 amostras de ácido cumárico (3), 6 amostras de ácido gálico (4) e 3 amostras de vanilina (5). As amostras foram analisadas em soluções na concentração de 10 mg/ml em acetona utilizando espectrofluorímetro Perkin-Elmer LS 55 com cubetas de quartzo de 1 cm de percurso ótico velocidade de scan de 1200nm/min e fendas de 2,5 nm. As leituras de fluorescência foram realizadas entre 400-600 nm de excitação com incremento de 25nm e a emissão na faixa de 430-650nm com incremento de 0,5 nm perfazendo 9 comprimentos de onda de excitação e 442 comprimentos de onda de emissão. As matrizes foram centradas na média e submetidas à Análise das Componentes Principais (PCA) com auxílio do Matlab 6.1.

A Figura 1 mostra os espectros de emissão para as substâncias aromáticas testadas nos comprimentos de onda de excitação de 400 nm e 425 nm.

A Figura 2 mostra o gráfico dos escores após tratamento covariante das matrizes para as diferentes substâncias puras. Apenas 2 componentes principais explicaram 99,82 % da variância dos dados sendo 91,42 % para PC1 e 8,40% para PC2. Analisando a distribuição das amostras no gráfico de escores, pode-se observar que na segunda componente principal (PC2), as amostras de ácido gálico apresentaram os valores mais positivos enquanto que as amostras de vanilina apresentam os valores mais negativos. Na PC1 as amostras de ácido caféico apresentam os valores de escores mais negativos na PC1 e próximo a zero na PC2. Os loadings que mais influenciaram PC1 foram correspondentes aos comprimentos de onda de excitação de 400 nm e 440 nm de emissão. Os loadings que mais influenciaram PC2

foram correspondentes aos comprimentos de onda de excitação de 425 nm e 476 nm de emissão.

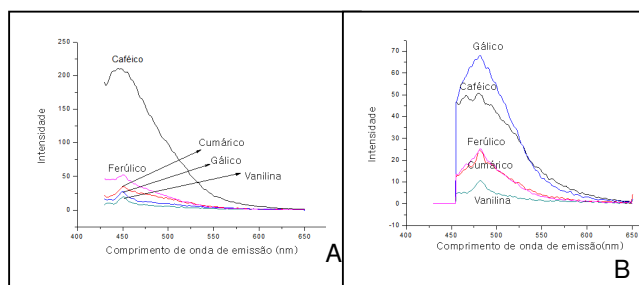


Figura 1. Espectros de emissão das substâncias 1-5: A) Em 400 nm de excitação; B) em 425 nm de excitação.

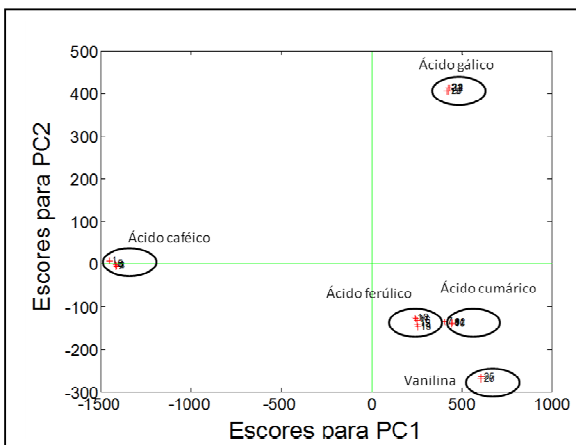


Figura 2. Escores PC1 versus PC2

Conclusões

Pelos resultados apresentados verifica-se que as substâncias aromáticas podem ser identificadas através da comparação de seus espectros de fluorescência com os de substâncias padrões por aplicação da Análise de Componentes Principais.

Agradecimentos

CAPES e CNPq

¹Meira, M.; Quintella, C. M.; Araujo, E. M. P.; David, J. P. Patente depositada no INPI protocolo n° 011100001121 em 23/12/2010.