Proposição de um modelo quimiométrico para diferenciação do AF em análises por UPLC-PDA de extratos das folhas de *Elaeis guineensis*

Mauro Vicentini Correia (PG), Augusto Lopes Souto (PG), José Antônio de Aquino Ribeiro (PQ), Patrícia Verardi Abdelnur (PQ), Clenilson Martins Rodrigues* (PQ)

clenilson.rodrigues@embrapa.br

Embrapa Agroenergia, Parque Estação Biológica – PqEB s/nº, W3 Norte (final), CEP 70770-901, Brasília-DF
Palavras Chave: *Elaeis guineensis, PLS-DA, UPLC-PDA, Amarelecimento Fatal*

Abstract

Proposal of a chemometric method for differentiation of FY in UPLC-PDA analysis of extracts from the leaves of *Elaeis guineensis*
Fatal yellowing (FY) is a disturb of unknown causes that affects oil palm. FY was investigated by a model of chemometric analysis in this study.

Introdução

Na América Central e do Sul, uma anomalia desconhecida e denominada de "amarelecimento fatal (AF)" afeta indivíduos da espécie *Elaeis guineensis* e provoca grande prejuízo econômico para os produtores de óleo de dendê.[1]
Com a finalidade de investigar a variabilidade química entre indivíduos com e sem AF, este trabalho abordou a aplicação de análises por PLS-DA (*Partial Least Square discrimant analysis*) como uma ferramenta de classificação capaz de diferenciar as análises por UPLC-PDA (Ultra High Perfomance *Liquid Chromatography – Photodiode array Detector*) dos extratos de folhas de indivíduos sadios e doentes.

Resultados e Discussão

Os extratos das folhas foram preparados com solução etanol 70% e o processo acelerado por ultrassom (5 min, 2x). Os extratos foram filtrados em cartuchos de fase sólida (SPE, C18, 500 mg). As análises dos extratos foram realizadas no equipamento ACQUITY UPLC H-Class, coluna Acquity UPLC® BEH C18 1,7 µm 2,1x150 mm. Foram injetados, em triplicata, 1,0 µL de extrato para cada amostra (8 amostras vegetais com AF e 8 amostras vegetais sem AF).
Os dados das áreas dos picos pelo tempo de retenção, no comprimento de onda de 330 nm, foram exportados para o excel e a análise de PLS-DA foi realizada no programa Matlab com a ferramenta "*Classification toolbox 3.1*".[2]
O modelo obtido foi capaz de separar, na fase de treino, plantas com AF e sadias com 100% de acerto, e na fase de teste o desempenho foi de 94% (classificou erroneamente somente a amostra F_S_AF_P8 injeção 2, sem AF, como sendo uma amostra com AF) (Fig. 1).

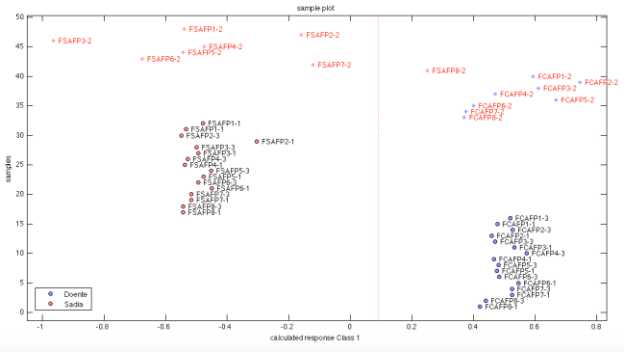

Figura 1. Gráfico de distribuição das amostras (treino: círculos, teste: asteriscos) em relação à resposta calculada para as amostras com AF, utilizando-se os dados extraídos das análises cromatográficas.

Além dos dados quimiométricos, a classificação espectroscópica (dados de UV/Vis), para os picos cromatográficos de cada amostra vegetal investigada, corroborou na atribuição da presença de flavonoides, especialmente flavonas derivadas da apigenina, como os principais metabólitos dos extratos. Essa informação será validada posteriormente com experimentos de UPLC-MS.

Conclusões

Com a utilização da ferramenta quimiométrica PLS-DA, foi possível confirmar a diferenciação de plantas de *Elaeis guineensis* com e sem AF. As taxas de acerto obtidas foram significativas. Os resultados alcançados demonstraram que o uso da técnica de UPLC-PDA pode ser uma importante ferramenta analítica na investigação das causas do AF. Análises complementares por UPLC-MS estão sendo realizadas para caracterizar os metabólitos divergentes entre as amostras com e sem AF.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, Embrapa Agroenergia e Marborges.

[1] Beuther, E.; Wiese, U.; Lucaks, N.; van Slobbe, W. G..; Riesner, D. *J. Phytopathology*. **1992**, *136*, 297-311.
[2] Ballabio, D.; Consonni, V. Anal Method Instrum **2013,** 5, 3790-3798.