



Fingerprint cromatográfico de erva-mate (*Ilex paraguariensis* A. St. Hil.) por MCR-ALS

Mateus, Rosângela. A. Jacques*

Instituto de Química, UFRGS, Porto Alegre, RS, Brazil, *rosangela.j@iglobo.com

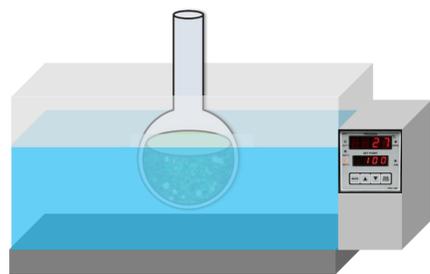
Introdução

Ilex paraguariensis A. St. Hil. (Erva-mate) é uma planta de grande interesse econômico e social, amplamente consumida como chimarrão e tererê. Atualmente, a erva-mate é exportada para várias partes do mundo, principalmente EUA e Europa, devido suas propriedades Nutricionais e medicinais (tônico, antioxidante, hipocolesterolêmico, antienvhecimento, anti-trombótico, anti-inflamatório etc). No entanto, faltam estudos na literatura que detalhem o *fingerprint* químico de diferentes produtos. Portanto, o objetivo deste estudo foi obter uma estratégia apropriada para investigar e resolver os principais compostos extraídos de amostras comerciais de *Ilex paraguariensis* por LC-DAD e MCR-ALS.



Experimental

Extração Assistida por Ultrassom (UAE):



Massa de Amostra: 4 g
Temperatura: 40 °C
Tempo: 10 min
Volume de EtOH: 15 mL
Frequência: 40 KHz

Fig. 1: Representação esquemática de um sistema de UAE

LC-DAD:

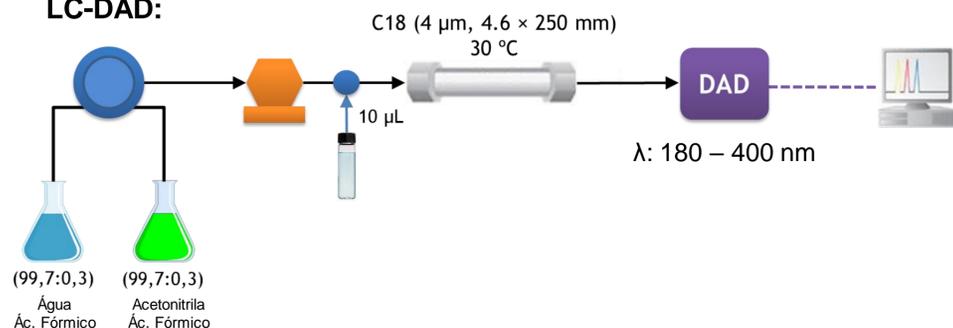


Fig. 2: Representação esquemática de um sistema de LC-DAD.

Resolução Multivariada de Curvas - Mínimos Quadrados Alternantes (MCR-ALS):

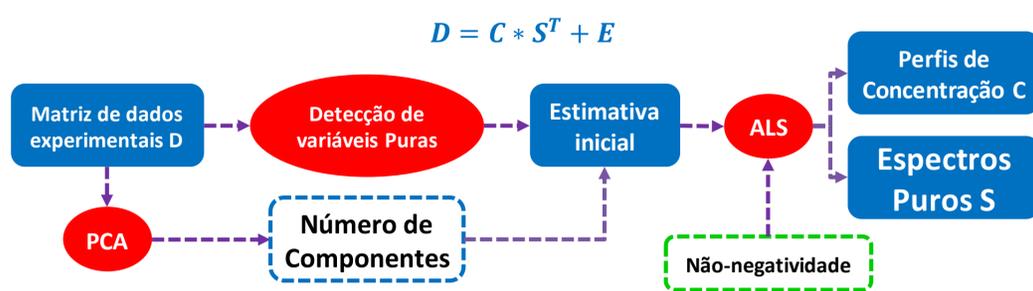


Fig. 3: Representação esquemática do algoritmo de MCR-ALS.

Resultados e Discussão

Correção de Linha de Base

A correção de linha de base em LC-DAD (Fig. 4A) foi realizada pelo algoritmo de mínimos quadrados assimétricos, gerando uma linha de base estimada (Fig. 4B) que foi subtraída dos dados originais. Como podemos ver na Fig. 4C, a linha de base foi efetivamente removida dos dados de LC-DAD.

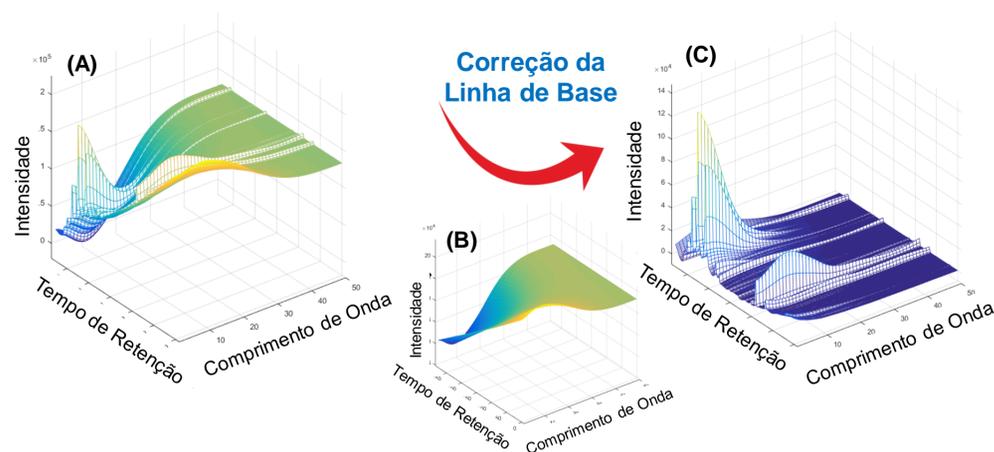


Fig. 4: Correção de linha de base por mínimos quadrados assimétricos (A) Cromatograma original; (B) Linha de base estimada; (C) Dados cromatográficos após subtração da linha de base.

MCR-ALS

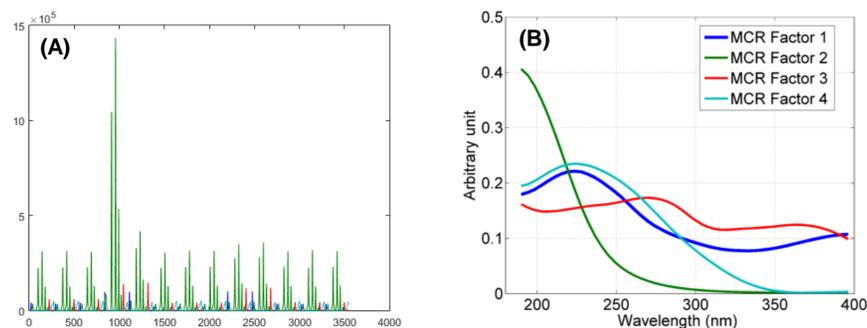


Fig. 5: (A) Dados de LC e (B) perfis espectrais recuperados por MCR.

Como pode ser visto na Fig. 5B, os perfis cromatográficos e espectrais recuperados pelo MCR são suaves e compatíveis com a eluição de compostos e absorção espectral molecular, respectivamente.

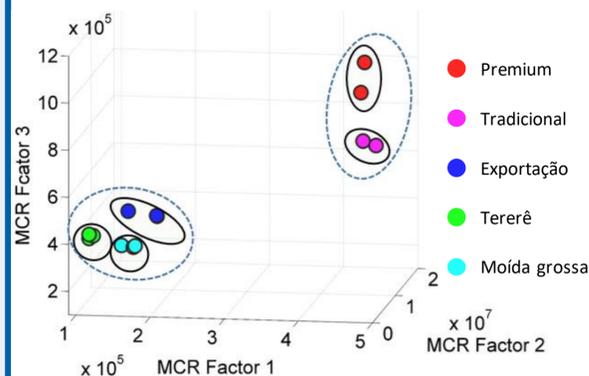


Fig. 6: Dispersão 3D para a concentração relativa dos três primeiros fatores do MCR

Na Fig. 6 podemos notar que as amostras foram agrupadas de acordo com o processamento industrial. Isso sugere que os dados cromatográficos possuem as informações químicas apropriadas para a discriminação da erva-mate em relação ao tipo de produção e o MCR conseguiu acessar essas informações.

Agradecimentos



Conclusões

- MCR-ALS é adequado para decomposição de dados de LC-DAD
- Os escores do MCR permitiram discriminar os tipos de erva-mate
- LC-DAD aliado ao MCR-ALS pode ser útil para o controle de qualidade de erva-mate