

# Predição Quimiotaxonômica de Amostras de Líquens via RMN de <sup>1</sup>H e Quimiometria – Análise de Extratos Brutos e Material Intacto

Gláucia Braz Alcantara\*<sup>1</sup> (PG), Andersson Barison<sup>1</sup> (PQ), Neli Kika Honda<sup>2</sup> (PQ), Márcia Miguel Castro Ferreira<sup>3</sup> (PQ), Antonio Gilberto Ferreira<sup>1</sup> (PQ).

<sup>1</sup>Laboratório de RMN, Departamento de Química - Universidade Federal de São Carlos, São Carlos/SP. <sup>2</sup>Laboratório de Pesquisa LP2, Departamento de Química, Universidade Federal de Mato Grosso do Sul, Campo Grande/MS. <sup>3</sup>Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas/SP. - \*glauca@dq.ufscar.br

Palavras Chave: Líquens, RMN, quimiometria

## Introdução

A determinação quimiotaxonômica de líquens é dificultada por sua grande semelhança morfológica e geralmente a sua caracterização é feita através de reações de coloração do talo, cromatografia, microcristalização e espectrometria de massas<sup>1</sup>. Assim, o desenvolvimento de metodologias mais simples de análise tem sido muito requerida para a caracterização desses organismos.

Trabalhos recentes apontam a RMN e a quimiometria como ferramentas potenciais para a análise de líquens, onde obteve-se a discriminação das famílias, gêneros e espécies<sup>2,3</sup>.

No presente trabalho, é apresentado a classificação de amostras desconhecidas de líquens, a partir dos extratos acetônicos brutos e material *in natura*, analisados por RMN e submetidos ao método quimiométrico de reconhecimento de padrões KNN (*Kth Nearest Neighbor*).

## Resultados e Discussão

Onze espécies padrão de líquens, referentes a seis gêneros e duas famílias, foram coletadas e obtidos os espectros de RMN de <sup>1</sup>H do material intacto, via RMN HR-MAS, e dos respectivos extratos acetônicos, RMN de líquidos. Após a aquisição dos espectros dos padrões, os dados foram convertidos em uma matriz, onde as linhas correspondiam às amostras e as colunas aos deslocamentos químicos, e por fim, foram construídos os modelos de classificação por KNN.

Para a predição quimiotaxonômica, um outro conjunto de amostras, desconhecidas ao modelo, foi paralelamente analisado por RMN HR-MAS e de líquidos e avaliadas por KNN.

Os modelos construídos apresentaram resultados muito interessantes, com predição correta de 70,8% das amostras intacto e 88,9% dos extratos brutos (Tabela 1). Nos dois casos, somente uma amostra foi predita inteiramente de forma incorreta.

Visto que todas as análises de RMN foram efetuadas em triplicata, na análise por HR-MAS, as amostras *P. breviciliatum* e *P. dilatatum* apresentaram uma replicata com comportamento

anômalo, conhecida em quimiometria como *outlier*, sendo que essa particularidade deve-se aos problemas intrínsecos à reprodutibilidade da técnica HR-MAS.

De acordo com os resultados obtidos, a metodologia desenvolvida mostrou ser simples, já que os espectros de RMN de <sup>1</sup>H são rapidamente adquiridos, além de não despender de inconvenientes com o pré-tratamento das amostras.

**Tabela 1.** Amostras de líquens empregadas para a predição quimiotaxonômica por RMN (extratos brutos e material intacto) e quimiometria.

Extrato Bruto	Material intacto
<i>C. cryptlorophaea</i> *	<i>H. speciosa</i> *
<i>D. aspera</i> *	<i>D. aspera</i> *
<i>P. breviciliatum</i> *	<i>P. breviciliatum</i> ∇
<i>P. cornuta</i> ⊗	<i>P. cornuta</i> *
<i>P. delicatulum</i> *	<i>P. dilatatum</i> ∇
<i>P. dilatatum</i> *	<i>P. mesotropum</i> *
<i>P. mesotropum</i> *	<i>P. tinctorum</i> ⊗
<i>P. tinctorum</i> *	<i>P. daedalea</i> *
<i>P. daedalea</i> *	-

\*predição correta; ⊗ predição errônea; ∇ amostra com uma replicata predita erroneamente.

## Conclusões

A classificação de líquens empregando-se espectros de RMN de <sup>1</sup>H e quimiometria tem mostrado excelentes resultados. A porcentagem de acerto na predição de amostras desconhecidas apresenta-se como um método promissor na caracterização de líquens.

## Agradecimentos

FAPESP, CNPq e CAPES

<sup>1</sup> Honda, N. K.; Vilegas, W. *Quím. Nova*. **1998**, *21*(6), 110.

<sup>2</sup> Alcantara, G. B.; Barison, A.; Ferreira, A. G., Honda, N. K.; Ferreira, M. M. C. 28<sup>ª</sup> RASBQ, **2005**.

<sup>3</sup> Alcantara, G. B.; Barison, A.; Ferreira, A. G., Honda, N. K. 27<sup>ª</sup> RASBQ, **2004**.