

Aplicação de Análise Exploratória em dados de ICP OES e RMN para alimentos produzidos organicamente e convencionalmente

Andréa P. Fernandes^{*1} (PG), Leila A. Tavares¹ (PG), Antonio G. Ferreira¹ (PQ), Márcia M. C. Ferreira² (PQ), Joaquim A. Nóbrega¹ (PG), deapfernandes@yahoo.com.br

1. Grupo de Análise Instrumental Aplicada (GAIA), Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP.
2. Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP.

Palavras Chave: Quimiometria, Alimentos, ICP OES, RMN.

Introdução

O arroz e o café estão entre os produtos mais consumidos pela população mundial. Os alimentos produzidos organicamente tiveram um crescimento considerável, sendo interessante avaliar se há diferenças químicas em relação ao produzido convencionalmente. A determinação dos principais constituintes inorgânicos por ICP OES, com prévia digestão assistida por radiação microondas e análise de compostos por RMN possibilitarão uma avaliação preliminar de similaridades e distinções entre as composições químicas desses. Pretende-se assim classificar quimiometricamente os diferentes tipos de arroz e café verde em relação ao modo de produção (orgânica e convencionalmente).

Resultados e Discussão

As amostras de arroz de diversos tipos (integral, parboilizado, polido e cateto) e de café verde (100% Arábica) de diferentes produtores foram digeridas empregando digestão assistida por radiação microondas (ETHOS 1600, Milestone) usando solução de HNO_3 2,0 mol L^{-1} . Na determinação de Al, Ba, Ca, Cu, Fe, K, Mg, Mn, Na, P, Rb, S, Si, Sn, Sr e Zn utilizou-se um ICP OES com configuração axial (Vista AX, Varian). Um equipamento de ressonância magnética nuclear Bruker (9,4 Tesla) com uma sonda BBI de 5 mm a 298 K foi empregado para obtenção dos espectros das amostras de café. A matriz de dados autoescalados utilizada na análise de componentes principais¹ para as amostras de arroz é composta de 18 amostras em duplicata e 15 variáveis. A análise HCA aplicada nesse conjunto de dados demonstrou clara separação entre os produzidos organicamente ou convencionalmente. A análise por PCA forneceu tendências e características similares à HCA, indicando que as variáveis utilizadas possibilitaram diferenciação entre os dois modos de produção. Alumínio, Rb, Sn e Fe são os responsáveis pela separação entre o arroz produzido organicamente e convencionalmente (Figura 1).

Em relação a matriz de dados consistindo de 15 variáveis

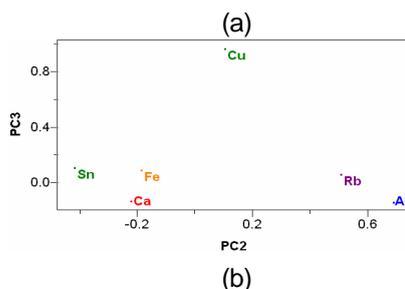
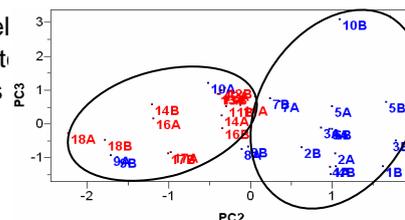


Figura 1. Gráfico de PC2 versus PC3, (a) scores e (b) loadings para amostras de arroz. Legenda: (●) organicamente produzido (●) convencionalmente produzido.

A análise de componentes principais, tanto para os dados de RMN quanto para os de ICP-OES para as amostras de café verde, foi feita utilizando-se várias formas de pré-processamentos e transformações matemáticas, mas nenhuma delas teve sucesso na discriminação entre os cafés orgânicos e os convencionais. A explicação pode ser devido ao fato desses dois tipos de cafés apresentarem composições químicas similares.

Conclusões

Foi possível o agrupamento do arroz por tipo de produção. As variáveis mais discriminatórias foram Al, Rb, Sn e Fe, sendo esses os principais elementos responsáveis pela discriminação entre produção orgânica e convencional. Não foi possível o agrupamento dos grãos de café verde por tipo de produção indicando que os dois grupos de amostras possuem características químicas semelhantes.

Agradecimentos

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)

Os autores agradecem a Capes, CNPq e Fapesp pelo apoio financeiro.

¹ K. R. Beebe, R. J. Pell, and M. B. Seasholtz, *Chemometrics: a Practical Guide* (John Wiley and Sons, New York, 1998).