



ESPECTROSCOPIA DE INFRAVERMELHO MÉDIO E QUIMIOMETRIA APLICADAS A DISCRIMINAÇÃO DE ACESSOS DE BANANEIRA

CRISTINE VANZ BORGES¹; FERNANDA RAMLOV²; SHIRLEY KUHNEN³; MARCELO MARASCHIN⁴; EDSON PERITO AMORIM⁵; CARLOS ALBERTO DA SILVA LEDO⁶

INTRODUÇÃO

O Brasil é o quinto produtor mundial de banana, tendo produzido aproximadamente 6,9 milhões de toneladas em 2010, em uma área aproximada de 487 mil hectares (FAO, 2012). Entretanto, há poucos cultivares para exploração comercial com potencial agrônomico, tolerantes às pragas e doenças e que apresentem frutos com boas características pós-colheita e organolépticas. Uma das estratégias à solução desse problema é a seleção de novos genótipos, por meio do melhoramento genético, visando o aumento do valor nutricional e funcional (biofortificação), associado às boas características agrônomicas. A técnica de espectroscopia vibracional de infravermelho médio com transformada de Fourier (FTIR), em combinação com o tratamento dos dados espectrais via tecnologias de bio-informática dedicadas (quimiometria) baseadas em ferramentas estatísticas de análise multivariada (i.e., análise dos componentes principais - ACP), tem sido utilizada na construção de modelos de descrição e classificação de matrizes complexas (alimentos, bebidas, extratos vegetais, e.g. - KUNHEN et al., 2010; SUBRAMANIAN et al., 2011), típicas de estudos metabolômicos aonde o número de variáveis excede em muito o número amostral. Esta abordagem analítica constitui uma opção aos métodos convencionais de análises químicas, não raro exigentes quanto ao preparo da amostra e de elevado custo. Neste contexto, este trabalho avaliou o uso da ATR-FTIR à obtenção de perfis metabólicos de amostras de polpa de frutos de acessos de bananeira. Os dados espectrais foram utilizados à construção de modelo descritivo, via cálculo dos componentes principais, como estratégia analítica à discriminação de acessos daquela frutífera.

¹ Eng. Agr., estudante de Pós-graduação, Universidade Federal do Recôncavo da Bahia, email: crisvanz@bol.com.br

² Bióloga, estudante de Pós-Doc da Universidade Federal de Santa Catarina, email: fe_biotec@yahoo.com.br

³ Bióloga., professora da Universidade Federal de Santa Catarina, email: shirley@cca.ufsc.br

⁴ Eng. Agr., professor da Universidade Federal de Santa Catarina, email: m2@cca.ufsc.br

⁵ Eng. Agr., pesquisador da Embrapa Mandioca e Fruticultura, email: edson@cnpmf.embrapa.br

⁶ Eng. Agr., pesquisador da Embrapa Mandioca e Fruticultura, email: ledo@cnpmf.embrapa.br

MATERIAL E MÉTODOS

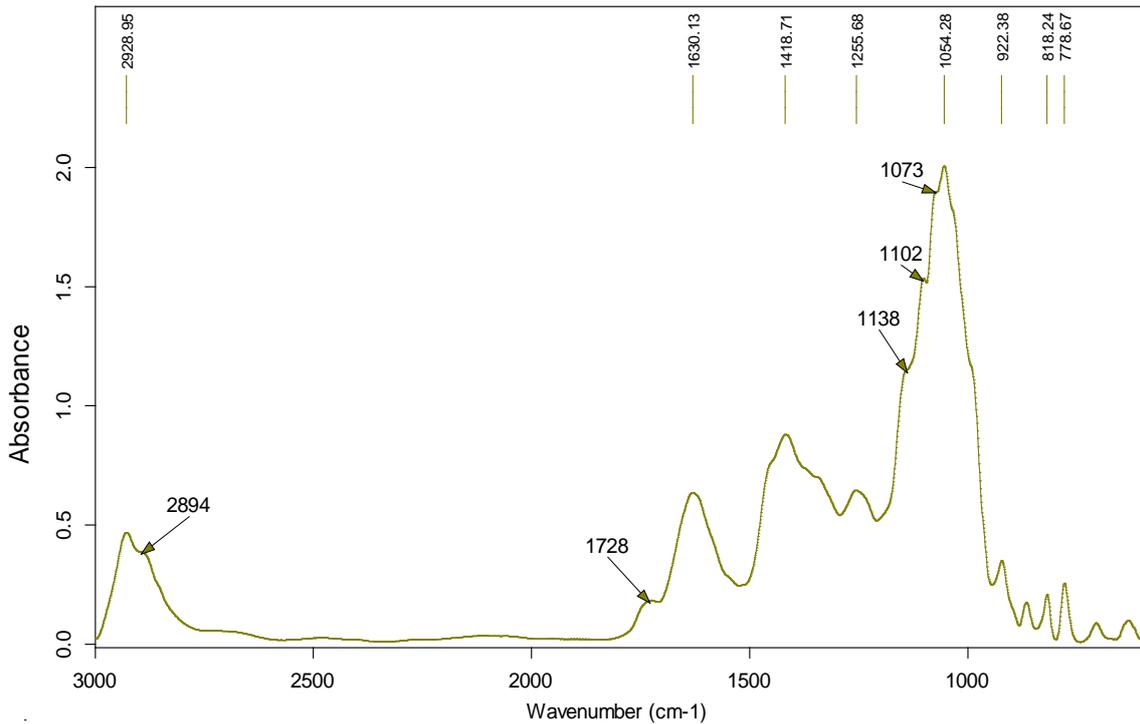
Amostras de frutos (estádio seis de maturação, totalmente amarelos) de 29 acessos de bananeiras, pertencentes ao Banco Ativo de Germoplasma da Embrapa Mandioca e Fruticultura, foram coletadas, seguido da remoção da casca, segmentação da polpa em rodela e transferência à estufa (45°C, peso constante).

A biomassa seca (~100 mg/amostra) foi finamente triturada (gral e pistilo, nitrogênio líquido) e amostras (~10 mg/amostra) foram submetidas à espectroscopia vibracional de FTIR em equipamento Bruker IFS 55, equipado com sistema de ATR de reflexão única (Golden Gate), coletando-se 128 varreduras/amostra, em janela espectral de 500 a 4000 ondas. cm^{-1} e com resolução de 4 ondas. cm^{-1} . O processamento dos espectros obtidos foi realizado com o auxílio do programa OPUS (Bruker Biospin, versão 5.0) e considerou a delimitação da janela espectral de interesse (3000-600 ondas. cm^{-1}), a correção da linha de base, a normalização, a otimização da relação sinal/ruído (*smoothing*) e a deconvolução dos sinais espectrais. Subsequentemente, o conjunto de dados totais e parciais (janelas espectrais de *fingerprint* de proteínas, carboidratos e lipídios) dos espectros processados foi normalizado e utilizado para a ACP, com auxílio do pacote estatístico Pirouette (v. 4.5., Infometrics, Inc. USA). O pré-tratamento dos dados espectrais à análise dos componentes principais é descrito por Kunhen et al., (2010).

RESULTADOS E DISCUSSÃO

A análise visual dos espectros de FTIR permitiu a detecção de um conjunto variável de bandas espectrais de FTIR (15 a 20 bandas, 3000-600 ondas. cm^{-1}) nas amostras de farinhas de polpa dos frutos dos acessos de bananeira. Estas discrepâncias indicam a existência de perfis metabólicos distintos, determinando composições químicas de polpa não homogêneas para os acessos. Os espectros de FTIR revelaram bandas tipicamente associadas à porção de hidrocarbonetos alifáticos constituinte de ácidos graxos e lipídios (2927 – 2885 ondas. cm^{-1} , LAMBERT, 2001 - Figura 1). A presença de compostos de origem protéica nas amostras é decorrente de sinais nas janelas espectrais de 1650-1550 ondas. cm^{-1} , relativos às funções amins I e II respectivamente (Lambert, 2001) e 1543-1480 ondas. cm^{-1} (amina II, SCHULZ; BARANSKA, 2007). Com relação à região de *fingerprint* para carboidratos (1200-850 ondas. cm^{-1}), bandas associadas ao componente amídico foram detectadas com intensidade relevante, dada à presença majoritária daquele componente polissacarídico na matriz em análise. O cálculo dos componentes principais a partir da totalidade de dados espectrais (i.e., 3000 – 600 ondas. cm^{-1}) não permitiu a detecção de padrões metabólicos discriminantes dos acessos em estudo (dados não mostrados). Em função disto, os dados espectrais associados às regiões de *fingerprints* de proteínas, carboidratos e lipídios foram submetidos isoladamente à ACP, visando à detecção de padrões de agrupamento e de variáveis relevantes à

Ambrosia



classificação dos acessos. A região de *fingerprint* de lipídios mostrou-se mais eficiente na discriminação dos acessos de bananeira. Os CP1 (59,6%) e CP2 (23,3%) contribuíram para explicar 85,9% da variância presente nos dados. O cálculo de CP3 gerou um acréscimo relevante (7,2%) à interpretação da variância associada aos dados espectrais, sendo que este modelo descritivo mostrou-se eficiente na detecção de características peculiares quanto à composição lipídica das polpas dos acessos Lidi, Tuuigia, e F3P4 (Figura 2). Estes acessos revelaram-se discrepantes, agrupando-se em CP1+/CP2-/CP3-.

Figura 1 – Detalhe do perfil espectral de infravermelho médio (ATR-FTIR, 3000 – 600 ondas.cm⁻¹) de amostra de farinha de polpa de banana (e.g., Ambrosia) do banco ativo de germoplasma da Embrapa Mandioca e Fruticultura.

to discrimination of landrace maize flours produced in southern Brazil. **Food Science & Technology**, v. 45, p. 1673-1681, 2010.

LAMBERT, J. B.; SHULVELL, H. F.; LIGHTNER, D. A.; COOKS, R. G. Organic Structural Spectroscopy. **Prentice Hall: Upper Saddle River**, p. 568, 2001.

SCHULZ, H.; BARANSKA, M. Identification and qualification of valuable plant substances by IR and Raman spectroscopy. **Vibrational Spectroscopy**, v. 43, p. 13-25, 2007.

SUBRAMANIAN, A.; ALVAREZ, V. B.; HARPER, W. J.; RODRIGUEZ-SAONA, L. E. Monitoring amino acids, organic acids, and ripening changes in Cheddar cheese using Fourier-transform infrared spectroscopy. **International Dairy Journal**, v. 21, p. 434-440, 2011.