

Espectroscopia no infravermelho próximo (NIRS) como ferramenta complementar para a discriminação de sementes do gênero *Paspalum*

Mariana de Oliveira Romão Corrêa¹; Marcelo Mattos Cavallari²; Avelardo Urano de Carvalho Ferreira³; Victor Rogério Del Santo⁴

¹Aluna de graduação em Bacharelado em Química Tecnológica, Universidade Federal de São Carlos, SP. Bolsista Embrapa/CNPq, Embrapa Pecuária Sudeste, São Carlos, SP; marioliv.correa@gmail.com;

²Pesquisador, Embrapa Pecuária Sudeste, São Carlos, SP.

³Analista, Embrapa Pecuária Sudeste, São Carlos, SP;

⁴Técnico, Embrapa Pecuária Sudeste, São Carlos, SP;

A espectroscopia no infravermelho próximo (NIRS) é sensível a transições de sobretons, ressonâncias e combinações dos modos vibracionais de ligações químicas. Pode ser empregada na identificação de compostos orgânicos pela correlação entre os espectros e a composição química da amostra. Apresenta pequena seletividade analítica devido à sobreposição das energias de absorção dos modos vibracionais no infravermelho próximo. A utilização da quimiometria, conjunto de ferramentas matemáticas e estatísticas aplicadas à química, é feita para corrigir ruídos e obter a informação química dos espectros. A análise de componentes principais (PCA) realiza a redução da dimensionalidade e permite a análise exploratória dos dados, agrupando as amostras por similaridade nas dimensões (PCs) de maior variabilidade dos dados. No laboratório de sementes da Embrapa Pecuária Sudeste (LASE) são recebidos lotes de sementes do Banco Ativo de Germoplasma (BAG) de *Paspalum*, que devem ser corretamente identificadas ao nível de espécie, processo trabalhoso realizado com base em características morfológicas. O objetivo deste trabalho foi verificar a viabilidade do uso do NIRS associado à PCA para discriminar diferentes sementes a partir das suas características químicas, visando à otimização dos processos de rotina do LASE. Os espectros foram coletados em triplicata, no modo de reflectância, em amostras de semente acondicionadas em embalagem tipo ziplock transparente, sem pré-tratamento das amostras. O equipamento portátil DLP® NIRscan™ Nano da Texas Instruments foi calibrado com padrão Spectralon® nas condições de análises das amostras. Foram utilizadas 260 amostras de sementes de *Paspalum* de diferentes espécies dos grupos Notata, Plicatula, Virgata, Dilatata e Malacophylla. Os dados foram tratados com a utilização dos softwares Origin, Excel e The Unscrambler. Os espectros foram submetidos aos seguintes pré-tratamentos: normalização, 1º derivada empregando o algoritmo de Savitzky-Golay, obtendo assim a redução do espalhamento espectral e enfatizando as informações químicas pertinentes das amostras. A PCA aplicada aos espectros NIRS não conseguiu distinguir todas as espécies de *Paspalum*, porém, através do gráfico de escores foi possível observar a discriminação de 4 dos 5 grupos analisados, demonstrando que a técnica tem potencial para uso na discriminação de sementes do gênero, abrindo perspectivas para sua aplicação em análises de vigor, germinação e identificação taxonômica das sementes, reduzindo o tempo dos processos de rotina do laboratório.

Apoio financeiro: INCTAA, Embrapa/CNPq (Projeto SEG 20.18.01.014.00.00)

Área: Ciências Exatas e da Terra

Palavras-chave: NIRS, PCA, Análise Exploratória dos Dados (EDA), Germoplasma.

Cadastro SisGen: A328577