

## **RELAXOMETRIA E QUIMIOMETRIA NA DIFERENCIAÇÃO DE BATATAS ORGÂNICAS**

Gabriel de M. S. Leal<sup>a</sup>, Jaqueline C. Pessoa<sup>a</sup>, Lorena R. Feitosa<sup>a</sup>, Christiane M. Nogueira<sup>a</sup>, Etelvino H. Novotny<sup>b</sup>, Rodrigo B. V. Azeredo<sup>a</sup> (\*)

<sup>a</sup> Departamento Química Orgânica, I. Q., Universidade Federal Fluminense - UFF

<sup>b</sup> Embrapa Solos \*rbagueira@vm.uff.br

*Keywords:* Relaxometry; Organic food; PCA

A certificação de produtos orgânicos se limita ao acompanhamento do processo produtivo por entidades certificadoras, inexistindo qualquer método analítico para aferição. Nesse cenário, a RMN, em especial a relaxometria aliada à quimiometria, é uma ferramenta que reúne qualidades importantes que a candidatam para essa aferição.

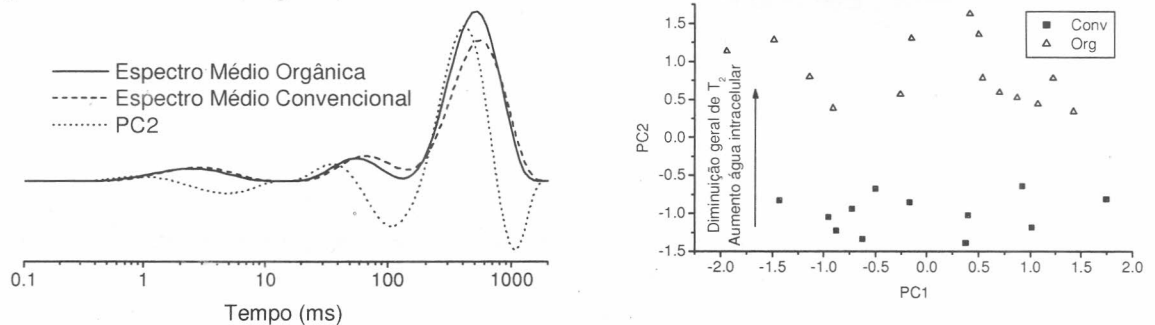
No artigo de Thybo et al. (2000) obteve-se a discriminação de batatas orgânicas e convencionais utilizando PCA em dados de relaxometria.<sup>1</sup> Contudo, como esse não era o objetivo do trabalho, os autores não exploraram o uso da técnica para esse fim. Os dados originais desse trabalho estão disponíveis na Internet para uso público (<http://www.models.kvl.dk/research/data/>), sob a forma de curvas de relaxação  $T_2$ , e parte deles foram utilizados no presente trabalho.

Os objetivos desse trabalho são: construir modelos multivariados que possibilitem a melhor discriminação entre batatas cultivadas de forma convencional e orgânica; avaliar a inversão de Laplace como pré-processamento dos dados e; verificar a validade dos modelos desenvolvidos a partir das medidas realizadas por Thybo et al. (2000) quanto sua aplicação em batatas brasileiras.

A partir do banco de dados disponibilizado foram extraídas 26 curvas de relaxação  $T_2$  de amostras de batata (12 convencionais e 14 orgânicas). Adicionalmente, 3 amostras de batatas, 1 convencional e 2 orgânicas, adquiridas no comércio local (Niterói-RJ) foram medidas em condições semelhantes às descritas pelo autor. As medidas de relaxação de  $^1\text{H}$  foram realizadas a 35° C num equipamento MQC (Oxford Instruments) de 0,7 T, através da seqüência CPMG, empregando pulsos de 90° de 7,5  $\mu\text{s}$ , tempo entre os ecos de 100  $\mu\text{s}$  e tempo de espera de 8 s. Foram adquiridos 4096 ecos, dos quais apenas os pares foram utilizados. Os espectros de relaxação  $T_2$  foram obtidos através da transformada inversa de Laplace (ILT) com 128 pontos logaritmicamente espaçados numa janela de 0,1 ms a 10 s, empregando o programa 2D Laplace Inversion ver.2 (Magritek). A análise quimiométrica dos dados foi realizada no programa MatLab (6.5).

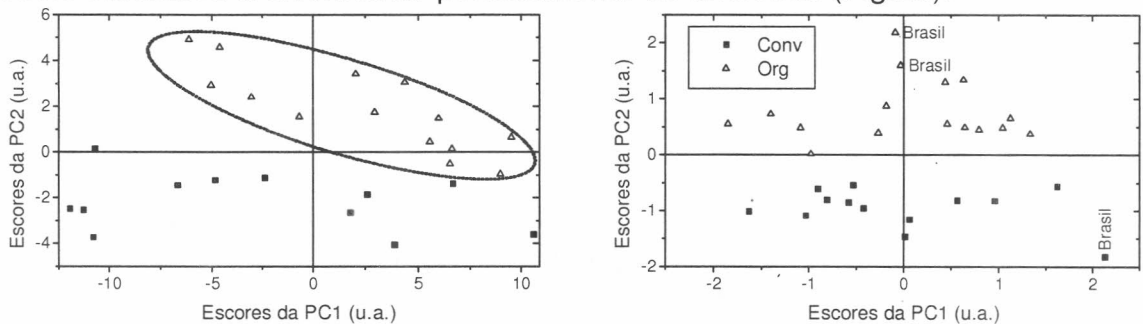
Para todas as amostras analisadas, os espectros de relaxação  $T_2$  apresentaram 3 domínios distintos (Fig.1a) referentes à água e suas diferentes localizações na estrutura da batata. Ao se efetuar a PCA, seguida de uma rotação orientada das PCs, foi possível depositar toda a capacidade de discriminação entre batatas orgânicas e convencionais do modelo (Fig.1b) sobre a segunda componente principal (PC2). Comparando os espectros médios com os

carregamentos da PC2, nota-se que a principal consiste no deslocamento do espectro das batatas orgânicas para menores valores de  $T_2$  além de um maior conteúdo de água com  $T_2 \cong 500$  ms, atribuída por Thybo et al. (2000) como sendo água intracelular (Fig.1a).



**Figura 1** - a) Espectros médios de relaxação  $T_2$  e carregamentos da PC2. b) Escores das duas primeiras componentes principais para os espectros de  $T_2$ .

Comparando-se também o desempenho das PCAs utilizando as curvas de relaxação (Fig.2a) ou espectros (Fig.1b), é possível observar que essa última promove uma melhor separação entre as amostras. Além disso, ao se refazer a PCA com rotação orientada, incluindo as três amostras de batatas brasileiras, o modelo continuou a discriminar perfeitamente as amostras (Fig.2a).



**Figura 2** - Escores das duas primeiras componentes principais: a) curvas de relaxação CPMG. b) espectros de  $T_2$  incluindo as amostras brasileiras.

Os resultados obtidos mostram que o uso da ILT, associada à PCA, além de facilitar a interpretação dos resultados, possibilita uma melhor discriminação entre batatas orgânicas e convencionais. Tais produtos diferem principalmente quanto a uma maior quantidade de água intracelular nas batatas orgânicas, e por essas apresentarem os três tipos de água detectados com menores tempos de relaxação  $T_2$ . Essas diferenças se mantêm para batatas brasileiras, indicando que essas devem ser características inerentes desse sistema de produção, podendo servir para aferição de produtos orgânicos, inclusive em produtos já colocados no mercado.

### Referências:

1. Thybo, A. K.; Bechmann, I. E.; Martens, M.; Engelsen, S. B.; *Lebensm.-Wiss. u.-Technol.* **2000**, 33, 103-111.

**FEC-Fundação Euclides da Cunha**