

**Poster (Painel)****1883-2 Classificação da biodiversidade de micro-organismos presentes nos sedimentos de manguezais do estado de São Paulo por RMN de 1H**

Autores: Angela Maria Montes Peral Valente (EMBRAPA - Empresa Brasileira de Pesquisas AgropecuáriasFAJ - CAMPUS II - Faculdade de JaguariúnaPOLICAMP - Faculdade Politécnica de Campinas) ; Elisangela Fabiana Boffo (UFBA - Universidade Federal da Bahia) ; Antonio Gilberto Ferreira (UFSCAR - Universidade Federal de São Carlos) ; Itamar Soares de Melo (EMBRAPA - Empresa Brasileira de Pesquisas Agropecuárias)

**Resumo**

A espectroscopia de RMN de 1H mostra em um único espectro todas as classes de substâncias presentes e em quantidades detectáveis. Entretanto, essa grande quantidade de informações pode dificultar a interpretação dos dados de um grande número de amostras. Neste sentido, a quimiometria tem sido aplicada com sucesso em dados espectrais para reduzir a sua complexidade e evidenciar as informações mais relevantes. A avaliação microbiana dos sedimentos dos manguezais (Cananéia, Bertioga não Contaminado e Contaminado [derramamento de 35 milhões de litros petróleo em 1983]) foi realizada analisando-se os espectros de RMN de 1H dos ácidos graxos presentes em maior concentração em 27 extratos (nove de cada manguezal), sendo três de cada ponto (1: próximo ao mar ou rio; 2: centro do manguezal e 3: área próxima ao continente). As amostras foram preparadas em triplicata diluindo-se 1,5 mg de extrato de ácido graxo em 0,6 mL de CDCl<sub>3</sub>. TMS ( $\delta$ 0,0) foi utilizado como referência dos sinais. Os espectros de RMN foram adquiridos a 298 K no equipamento Bruker DRX400 (9,4 Tesla - 400,2 MHz para a frequência do hidrogênio). A matriz de dados foi construída no programa Origin 8.0 e analisada no programa Pirouette 4.0. As transformações usadas foram a divisão pela norma um e a primeira derivada e o pré-processamento foi o autoescalamamento. Este estudo foi iniciado pela análise visual dos espectros de RMN de 1H dos extratos dos ácidos graxos, onde foram observados os sinais dos hidrogênios do alquil ester, que é o composto majoritário nas amostras. A análise quimiométrica foi feita através da Análise por Componentes Principais (PCA), sendo que a melhor discriminação das amostras foi obtida mantendo-se os sinais dos ácidos graxos de cadeia ramificada, insaturados, hidroxilados. No gráfico de escores de PC1 x PC2 (24,0% e 17,2% de variância, respectivamente) observou-se a discriminação das amostras em três grupos (ácidos graxos da parede celular dos micro-organismos isolados dos sedimentos dos manguezais de Bertioga Contaminado, não Contaminado e Cananéia). Além disso, verificou-se que as replicatas de cada ponto de coleta estão agrupadas, mostrando a reprodutibilidade dos dados. Os resultados mostram que a biodiversidade microbiana dos três manguezais apresenta pequenas diferenças, mas que podem ser observadas fazendo-se uso da RMN de 1H aliada a métodos quimiométricos.