



**UNIVERSIDADE DA INTEGRAÇÃO INTERNACIONAL DA LUSOFONIA
AFRO-BRASILEIRA
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
CURSO DE LICENCIATURA EM QUÍMICA**

DANIELLY DAS GRAÇAS SOUSA DO NASCIMENTO

**EMPREGO DA ESPECTROSCOPIA NA REGIÃO DO INFRAVERMELHO
PRÓXIMO PARA ESTUDO EXPLORATÓRIO DAS ESPÉCIES DE “BOLDO” NO
MACIÇO DE BATURITÉ**

**REDENÇÃO-CE
2024**

DANIELLY DAS GRAÇAS SOUSA DO NASCIMENTO

**EMPREGO DA ESPECTROSCOPIA NA REGIÃO DO INFRAVERMELHO
PRÓXIMO PARA ESTUDO EXPLORATÓRIO DAS ESPÉCIES DE “BOLDO” NO
MACIÇO DE BATURITÉ**

Monografia apresentada ao Curso de Licenciatura em Química da Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira – UNILAB, como requisito parcial para obtenção do título de licenciado em Química

Orientadora: Profa. Dra. Livia Paulia Dias Ribeiro

REDENÇÃO-CE

2024

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira
Sistema de Bibliotecas da UNILAB
Catalogação de Publicação na Fonte.

Nascimento, Danielly das Graças Sousa do.

N193e

Emprego da espectroscopia na região do infravermelho próximo para estudo exploratório das espécies de "boldo" no Maciço de Baturité / Danielly das Graças Sousa do Nascimento. - Redenção, 2024.

28f: il.

Monografia - Curso de Química, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Redenção, 2024.

Orientador: Profa. Dra. Livia Paulia Dias Ribeiro.

1. Boldo. 2. Espectroscopia de infravermelho. 3. Quimiometria. I. Título

CE/UF/BSP

CDD 543.072

DANIELLY DAS GRAÇAS SOUSA DO NASCIMENTO

**EMPREGO DA ESPECTROSCOPIA NA REGIÃO DO INFRAVERMELHO
PRÓXIMO PARA ESTUDO EXPLORATÓRIO DAS ESPÉCIES DE “BOLDO” NO
MACIÇO DE BATURITÉ**

Monografia apresentada como requisito para a obtenção do título de Licenciado em Química, na Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, UNILAB – Campus das Auroras.

Aprovado em: 15 de julho de 2024.

BANCA EXAMINADORA

Profa. Dra. Lívia Paulia Dias Ribeiro (Orientadora)

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira – UNILAB

Profa. Dra. Mônica Regina Silva de Araújo

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira – UNILAB

Dr. Venícios Gonçalves Sombra

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira – UNILAB

AGRADECIMENTOS

À minha mãe, que é a minha maior inspiração.

À minha família, por acreditar em mim e me apoiar, de diversas formas, durante essa fase.

Aos meus amigos, em especial à Tayane, Rodrigo e Iury, por proporcionar momentos de risada, confusão e de apoio.

À Maria Herivanda, que para além de inspiração e apoio, sua confiança foi fundamental para a conclusão dessa etapa.

À minha orientadora, professora Lívia Paulia, pela confiança, conhecimento repassado e auxílio durante o processo de construção do trabalho.

Aos professores do curso e técnicos dos laboratórios de química, pelos ensinamentos.

Ao Quilombo da Serra do Evaristo, em especial à mestre do saber da comunidade, dona Socorro, pelo conhecimento, conversas e café.

Ao Núcleo Avançado de Tecnologias Analíticas (NATA).

Ao Instituto Nacional de Ciências e Tecnologias Analíticas Avançadas (INCTAA).

À Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB).

RESUMO

O trabalho intitulado "Emprego da espectroscopia na região do infravermelho próximo para estudo exploratório de espécies de 'boldo' no maciço de Baturité", investiga o uso da espectroscopia no infravermelho próximo (NIR) para analisar três espécies de boldo: malvarisco (*Plectranthus amboinicus*), boldo miúdo (*Plectranthus ornatus*) e boldo do Brasil (*Plectranthus barbatus*). Para o estudo, foram coletadas 24 amostras de boldo em duas localidades, no quilombo da Serra do Evaristo e na cidade de Pacoti. As amostras foram analisadas utilizando um espectrofotômetro de infravermelho portátil MicroNIR, que operou na faixa de 900 nm a 1700 nm. Os dados espectrais foram processados usando o software "The Unscrambler X", aplicando técnicas de quimiometria para distinguir as espécies e determinar o pré-tratamento de dados da Análise de Componentes Principais (PCA) mais eficiente. Os resultados mostraram que a espectroscopia NIR, combinada com a quimiometria, é eficaz para diferenciar as espécies de boldo, destacando as potencialidades desta técnica moderna e não destrutiva na análise de plantas medicinais. O estudo também enfatiza a importância das plantas medicinais na cultura local e a preservação dos conhecimentos tradicionais associados, contribuindo para a valorização dos saberes ancestrais.

Palavras-chave: Boldo. Espectroscopia NIR. Saberes Tradicionais. Quimiometria.

ABSTRACT

The work entitled "The Use of Near-Infrared Spectroscopy for Exploratory Study of 'Boldo' Species in the Baturité Massif" investigates the application of near-infrared (NIR) spectroscopy to analyze three species of boldo: malvarisco (*Plectranthus amboinicus*), boldo miúdo (*Plectranthus ornatus*), and boldo do Brasil (*Plectranthus barbatus*). For the study, 24 samples of boldo were collected from two locations, in the quilombo of Serra do Evaristo and the city of Pacoti. The samples were analyzed using a portable MicroNIR infrared spectrophotometer, operating in the range of 900 nm to 1700 nm. Spectral data were processed using the software "The Unscrambler X," applying chemometric techniques to distinguish the species and determine the most efficient data pretreatment for Principal Component Analysis (PCA). The results showed that NIR spectroscopy, combined with chemometrics, is effective in differentiating the boldo species, highlighting the potential of this modern and non-destructive technique in the analysis of medicinal plants. The study also emphasizes the importance of medicinal plants in local culture and the preservation of associated traditional knowledge, contributing to the appreciation of ancestral knowledge.

Keywords: Boldo. Chemometrics. Near-Infrared. NIR Spectroscopy. Traditional Knowledge.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Regiões do espectro eletromagnético.....	12
Figura 2 – Amostras da espécie de boldo miúdo no saco de coleta.....	18
Figura 3 – Fotos das folhas das amostras estudadas do boldo: A) Malvarisco; B) Boldo miúdo e C) Boldo do Brasil.....	18
Figura 4 – Imagens da obtenção dos dados da folha de boldo miúdo: A) Amostras sobre equipamento e B) Dados espectrais da amostra.....	19
Figura 5 – Espectro NIR das amostras de boldo sem pré-tratamento.....	20
Figura 6 – Espectro NIR das amostras de boldo com pré-tratamento com SNV.....	20
Figura 7 – Espectro NIR das amostras de boldo com pré-tratamento de SNV com primeira derivada Savitzky-Golay.....	22
Figura 8 – Espectro NIR das três espécies estudadas: Malvarisco (cor azul), Boldo miúdo (cor verde) e Boldo do Brasil (cor vermelha).....	23
Figura 9 – Gráfico dos escores da PCA com pré-tratamento SNV, com classificação das espécies estudadas: malvarisco (cor azul), boldo miúdo (cor verde) e boldo do Brasil (cor vermelha).....	24
Figura 10 – Gráfico dos escores da PCA com o pré-tratamento SNV e primeira derivada, com classificação das espécies de boldo.....	24
Figura 11 – Escores da PCA com pré-tratamento SNV com primeira derivada com marcação das variedades do boldo e sua localidade.....	25

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	9
2 REFERENCIAL TEÓRICO.....	11
2.1 Boldo.....	11
2.2 Espectroscopia.....	11
2.3 MicroNIR.....	12
2.4 Quimiometria.....	13
2.5 Análise e tratamento de dados.....	14
2.6 O Quilombo da Serra do Evaristo.....	15
2.7 Pacoti.....	16
3 METODOLOGIA.....	17
3.1 Coleta das amostras.....	17
3.2 Obtenção dos dados espectrais.....	18
3.3 Tratamento de dados.....	19
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	20
5 CONCLUSÃO.....	26
6 REFERÊNCIAS.....	27

1 INTRODUÇÃO

Durante a história da humanidade sempre existiu a necessidade de se resolver problemas que envolvessem doenças ou enfermidades. Os povos ancestrais dependiam exclusivamente da natureza e descobriram nas plantas uma forma de cuidar de seu corpo, e a partir do uso e da observação de certas práticas iniciou-se o que levaria a base da medicina (ALMEIDA, 2011).

A utilização das plantas medicinais é uma característica histórica das civilizações antigas, um caso bem descrito disso são os povos egípcios que utilizavam uma vasta diversidade de conhecimentos e práticas que serviam de modelo para a medicina moderna (ALMEIDA, 2011). No Brasil, além dos saberes tradicionais indígenas, as contribuições dos imigrantes e dos africanos desempenharam um papel crucial no desenvolvimento de uma medicina popular diversificada, fundamentada no uso da biodiversidade vegetal (SIMÕES et al. 1989).

Nesse contexto, dentro da medicina atual existe uma forte desvalorização do conhecimento ancestral e exploração deles. De acordo com Paula (2004), um ponto crítico reside na disparidade entre os princípios das comunidades tradicionais e os interesses corporativos, notadamente das multinacionais que são grandes defensoras do sistema de patentes. Enquanto as comunidades tradicionais buscam preservar suas práticas e inovações como expressão de sua identidade cultural e espiritual, as grandes corporações do setor farmacêutico estão focadas, principalmente, nos ganhos econômicos derivados da exploração comercial desses saberes.

Diante do exposto, se por um lado, a indústria farmacêutica conseguiu difundir de forma homogênea a distribuição de medicamentos para toda a população, uma vez que diversos fatores como as condições climáticas e regionais, impedem o cultivo de determinadas plantas, por outro, ela incorporou de maneira exploratória um vasto conjunto de saberes e práticas oriundos de um longo processo histórico que amalgama conhecimento e fé em um único contexto, tendo em vista que povos ancestrais há muito tempo utilizavam práticas tradicionais de cura, ao mesmo tempo em que fortaleciam suas práticas por meio da fé.

Por meio de uma pesquisa bibliográfica, notou-se uma carência de estudos sobre as espécies de boldo que envolvessem o uso do infravermelho próximo. Portanto, esta pesquisa busca determinar, por meio do infravermelho próximo, quais comprimentos de onda diferenciam 3 espécies de boldo, sendo elas o malvarisco (*Plectranthus amboinicus*), boldo miúdo (*Plectranthus ornatus*) e boldo do Brasil (*Plectranthus barbatus*), além de determinar qual pré-tratamento de dados da PCA é mais eficiente para essa distinção.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

2.1 Boldo

O boldo é uma planta utilizada na medicina popular tradicional devido às suas propriedades medicinais (MISINFUSIONES, 2024). Existem várias espécies de boldo, sendo as mais conhecidas o boldo-do-chile (*Peumus boldus*) e o boldo-da-terra (*Plectranthus barbatus*).

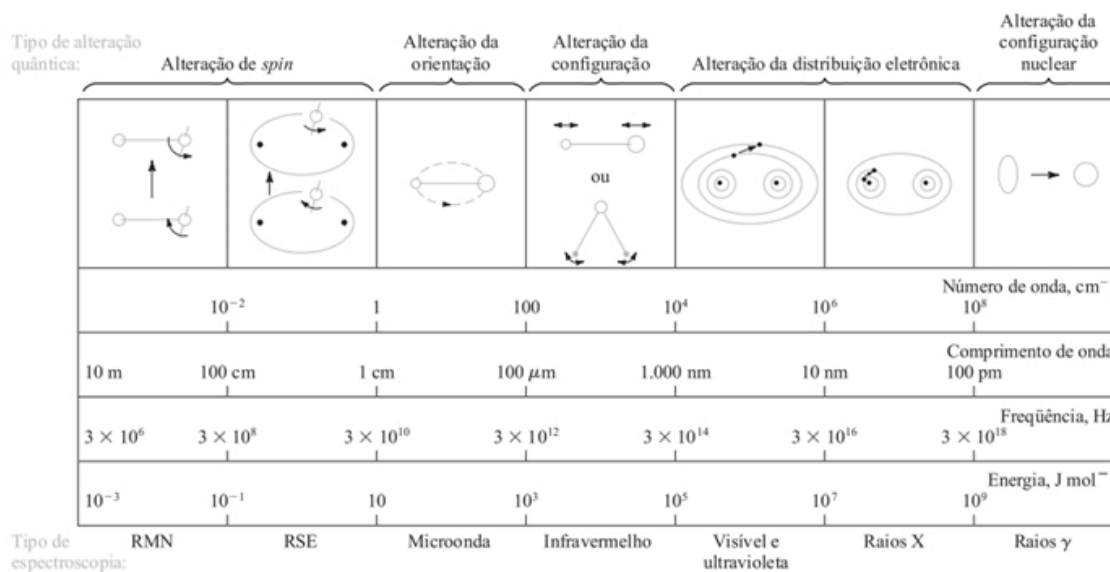
As espécies, popularmente chamadas de “boldo” pelos brasileiros, são utilizadas para tratar de enfermidades do estômago e fígado (LORENZI e MATOS, 2002).

2.2 Espectroscopia

Ao discutir sobre luz, é essencial entender que ela pode ser descrita tanto como ondas quanto como partículas. O comprimento de onda (λ), é a distância de pico a pico entre as ondas, e a frequência (ν), é o número de oscilações que a onda realiza por segundo, são características fundamentais que definem a luz (HARRIS, 2011).

Em relação ao fenômeno da luz, é crucial entender que ela abrange diversas regiões do espectro eletromagnético. Cada região é caracterizada por uma correlação específica entre frequência (Hz), comprimento de onda (nm) e energia (KJ). O espectro eletromagnético se estende desde os raios gama (com frequência da ordem de 3×10^{20} Hz), passando pelos raios X (3×10^{18} Hz), ultravioleta (3×10^{16} Hz), a região visível, infravermelho (3×10^{14} a 3×10^{12} Hz), micro-ondas (3×10^8 Hz), até alcançar as frequências de rádio, como mostrado na Figura 1. Essa compreensão é fundamental para a física moderna (HARRIS, 2011) e também para outros campos de estudo, como a Química.

Figura 1 – Regiões do espectro eletromagnético



Fonte: (SKOOG D. A., 2006).

2.3 MicroNIR

O Micro Espectrômetro na Região do Infravermelho Próximo, também conhecido como microNIR, é um equipamento de análise espectral altamente versátil e de fácil manuseio. Semelhante a outros métodos espectrométricos, o microNIR opera numa faixa de comprimento de onda específico, que varia de 900 nm a 1700 nm dentro da faixa do infravermelho próximo, apresentado na Tabela 1. O equipamento é composto por uma lâmpada, uma lente, um sensor, um seletor de comprimento de onda e uma janela por onde a radiação passa atingindo a amostra.

Tabela 1 – Regiões espectrais do infravermelho

Região	Intervalo de número de onda ($\tilde{\nu}$) – (cm⁻¹)	Região em comprimento de onda (λ), nm	Região de Frequência (ν), Hz
Próximo (NIR)	12800 a 4000	780 a 2500	$3,8 \times 10^{14}$ a $1,2 \times 10^{14}$
Médio (NIR)	4000 a 200	2500 a 5000	$1,2 \times 10^{14}$ a $6,0 \times 10^{12}$
Distante (FAR)	200 a 10	5000 a 100000	$6,0 \times 10^{12}$ a $3,0 \times 10^{11}$

Fonte: HOOLER; SKOOG; CROUCH, 2009.

Uma das principais vantagens do microNIR é o seu caráter não destrutivo, permitindo a análise repetida da mesma amostra sem causar danos físicos e químicos (FIRMANI et al., 2019a). Além disso, o equipamento é capaz de analisar amostras sólidas e líquidas, oferecendo uma ampla gama de aplicações. Para operar o microNIR, é necessário apenas um computador - seja um notebook ou um PC - para executar o software do equipamento. Esta facilidade de uso torna o microNIR uma ferramenta valiosa em diversas áreas de pesquisa e indústria.

2.4 Quimiometria

O termo “Quimiometria” surgiu em 1971, utilizado pela primeira vez pelo químico orgânico Svante Wold (1941-2022). A Quimiometria surgiu da necessidade de se extrair informações relevantes de uma ampla variedade de dados complexos produzidos pela modernização de equipamentos analíticos. Essa área de estudo destina-se para a análise de dados multivariados, em outras palavras, trata-se de dados em que diversas variáveis são medidas ao mesmo tempo em uma amostra específica (FERREIRA, 2015).

2.5 Análise e tratamento de dados

A análise e o processamento de dados constituem etapas cruciais na pesquisa científica. Áreas como Direito Administrativo, Educação, Administração e as Ciências Exatas, estão cada vez mais demandando profissionais especializados nesse tipo de atividade. Teixeira (2003), enfatiza a relevância do processamento de dados no contexto da pesquisa científica:

[...]abordar a análise de dados enquanto etapa do processo de investigação científica no campo das organizações configura-se como relevante, uma vez que a tentativa de identificar especificidades pode significar melhores condições para o desenvolvimento de novos estudos, com base num melhor e maior entendimento conceitual do processo, alinhado aos respectivos paradigmas (TEIXEIRA, 2003).

Conforme destacado, a análise e o processamento de dados são fundamentais para o aprimoramento e o desenvolvimento de novos estudos e pesquisas. Esse processo é de extrema relevância em todas as áreas do conhecimento, e a Química não é uma exceção a essa regra.

O *software* “The Unscrambler X”, auxilia no processo de análise multivariada de dados. Com uma ampla gama de ferramentas estatísticas avançadas, como a análise de componentes principais (PCA), espalhamento de luz (MSC, do inglês Multiplicative Scatter Correction), correção da variação normal padrão (SNV, do inglês Standart Normal Variance) e primeira derivada com algoritmo Savitzky-Golay, com janela de 3 pontos.

A correção de dispersão multiplicativa (MSC), minimiza os efeitos de espalhamento de luz. De acordo com Morgano et al. (2001), a técnica de correção do espalhamento de luz é um processo matemático utilizado para corrigir os efeitos causados pelo espalhamento de luz obtidos nos espectros, onde a interferência é reduzida tomando como referência o espalhamento médio de todos os espectros que compõem a matriz de dados.

Segundo Mishra et al. (2020), novas tendências de pré-processamento de dados têm sido desenvolvidas com base no conjunto de múltiplas técnicas de pré-processamento, como a SNV, variância normal padrão. O Manual do Produto da Teoria OMNIS NIR (2024), explica sobre o processo da SNV:

“O SNV normaliza um espectro individual para a variância 1 e o valor médio 0. O SNV normaliza os valores de absorvância, para cada comprimento de onda dentro de uma faixa de comprimento de onda. [...] Por meio da normalização, a variância entre os espectros é eliminada. Isso é importante caso a variância seja resultante de propriedades que não sejam de interesse [...]” (Teoria OMNIS NIR, 2024).

O pré-tratamento de primeira derivada é uma técnica matemática utilizada para melhorar a resolução e a distinção entre picos de absorção que podem estar sobrepostos, ou seja, ela pode destacar ombros espectrais, fazendo com que informações contidas ao longo do comprimento de onda analisado sejam acentuadas.

2.6 O Quilombo da Serra do Evaristo

No contexto histórico brasileiro, os quilombos emergiram aproximadamente no século XVI, representando a resistência dos negros mantidos em condição de escravidão durante o regime colonial. Estes locais serviam como refúgios para escravizados, onde buscavam se livrar da situação de opressão para expressar sua cultura e liberdade como modo de resistência - aspectos que eram considerados negativos pelos proprietários (FIABANI, 2008). No Brasil, os quilombos possuem uma forte simbologia que marca séculos de luta contra o regime escravocrata que perdurou quase 4 séculos. Durante toda a sua existência, eles não apenas erodiram o sistema escravista, mas também exerceram uma influência significativa em seu núcleo, afetando profundamente a escravidão e, simultaneamente, estabeleceram uma sociedade alternativa composta por pessoas livres da condição de subalternidade (MOURA, 2021).

O Quilombo da Serra do Evaristo, localizado no município de Baturité, encontra-se a uma distância aproximada de 120 km da capital do estado, Fortaleza. Este quilombo é um dos mais antigos do Estado do Ceará e abriga aproximadamente 130 famílias que formam a comunidade. O acesso à comunidade é feito por uma estrada pavimentada (SANTOS e SOUSA, 2020) via CE-060. A rota é caracterizada por uma vegetação nativa abundante e abismos que margeiam a estrada, o que torna a viagem ao local desafiadora e perigosa.

2.7 Pacoti

A cidade de Pacoti fica localizada na região do maciço de Baturité, no estado do Ceará. É uma área conhecida por suas serras e por possuir um clima ameno. Por se encontrar em uma área montanhosa, a elevação contribui para a cidade ter um clima fresco e úmido, o que favorece a existência de uma rica vegetação e biodiversidade.

3 METODOLOGIA

3.1 Coleta das amostras

O total de 24 amostras foram coletadas em localidades diferentes no Maciço de Baturité. Foram coletadas em um canteiro comunitário, que continha uma grande variedade de plantas medicinais, no Quilombo da Serra do Evaristo (4°22'39.6"S 38°55'02.6"W) e em duas localidades da cidade de Pacoti, no bairro Planalto (4°13'45.0"S 38°55'11.8"W) e na comunidade do sítio Colina (4°09'16.6"S 38°56'25.0"W).

Foram coletadas 10 amostras no Quilombo da Serra do Evaristo, sendo 5 amostras de boldo miúdo, 3 amostras de boldo do Brasil e 2 amostras de malvarisco. Na cidade de Pacoti foram coletadas 14 amostras, sendo 5 de boldo miúdo, 5 de boldo do Brasil e 4 de malvarisco.

Durante as visitas de coleta no quilombo, a Mestre dos Saberes e das Culturas Populares da comunidade, dona Maria do Socorro Fernandes Castro, explicava a utilidade das plantas.

De acordo com a mestra, o boldo miúdo possui uma folha bem pequena, diferentemente da folha do boldo do Brasil, que é maior e mais larga, outra diferença entre elas é o cheiro, o boldo miúdo possui um odor mais suave comparado ao do boldo do Brasil. As duas ervas possuem quase a mesma utilidade, sendo usadas para problemas digestivos e dores no estômago. Os dois podem ser utilizados para se preparar chá, entretanto, por conta dos tamanhos se utiliza uma quantidade diferente de folhas. Além do chá, o boldo miúdo também é utilizado no preparo de xarope. A diferença do malvarisco para as outras duas, é que ele apresenta uma folha mais grossa e possui um odor mais forte. O malvarisco é utilizado no preparo do xarope e de garrafadas, que servem para problemas de inflamação.

Após a coleta das folhas, as amostras foram armazenadas em um saco plástico estéril, conforme ilustrado na Figura 2, e levadas ao Laboratório de Química Analítica da Unilab, Campus das Auroras em Redenção-CE, para obtenção dos dados espectrais.

Figura 2 – Amostras da espécie de boldo miúdo no saco de coleta



Fonte: Autora (2024)

As folhas das espécies de boldo analisadas para este trabalho estão apresentadas na Figura 3. A Figura 3a é imagem de uma folha da espécie do malvarisco (*Plectranthus amboinicus*), a Figura 3b é do boldo miúdo (*Plectranthus ornatus*) e da Figura 3c é imagem da folha do boldo do Brasil ou boldo da folha larga (*Plectranthus barbatus*).

Figura 3 – Fotos das folhas das amostras estudadas do boldo: A) Malvarisco; B) Boldo miúdo e C) Boldo do Brasil

A – Malvarisco



B – Boldo miúdo



C – Boldo do Brasil



Fonte: Autora (2024).

3.2 Obtenção dos dados espectrais

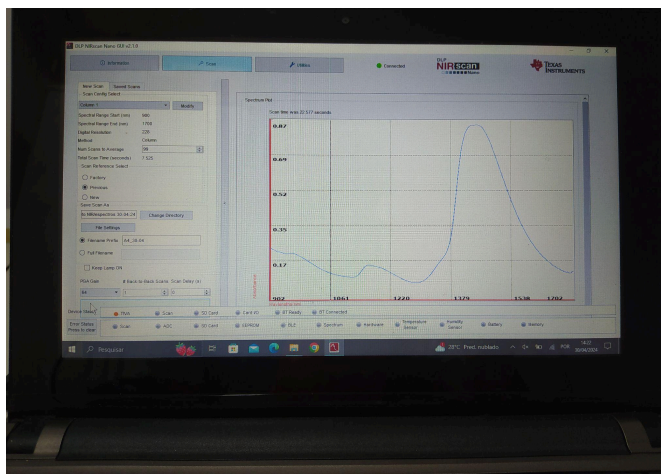
Utilizou-se o equipamento MicroNIR, equipamento de infravermelho próximo portátil, modelo DLP® NIRscan™ Nano Evaluation Module, Texas Instruments. Os dados espectrais foram obtidos na faixa 900 nm - 1.700 nm, com média de 50 varreduras. Os espectros de reflectância difusa de cada amostra foram determinados pela média de 3 réplicas, contra o branco realizado com uma pastilha de teflon, ilustrado na Figura 4.

Figura 4 – Imagens da obtenção dos dados espectrais da folha de boldo miúdo: A) Amostra sobre o equipamento e B) Dados espectrais da amostra

A – Amostra sobre o equipamento



B – Dados espectrais da amostra



Fonte: Autora (2024).

3.3 Tratamento de dados

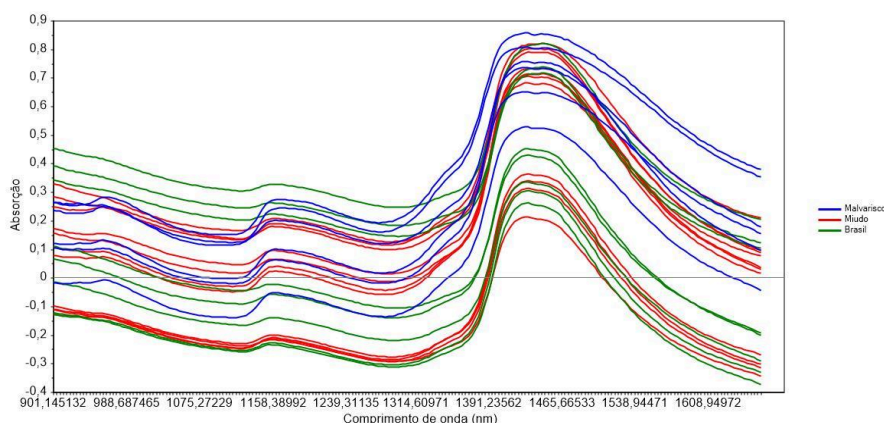
Para o tratamento de dados utilizou-se o *software* “The Unscrambler X”, que auxilia no processo de análise multivariada de dados. Utilizou-se uma PCA com aplicação dos métodos de tratamento espectral separadamente e combinado do MSC, SNV e primeira derivada com algoritmo Savitzky-Golay, com janela de 3 pontos.

A avaliação do método mais eficiente foi realizada pelo gráfico de escores da Análise de Componente Principal (PCA), tendo como critério de decisão a formação de classes distintas correspondentes às espécies de boldo.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

A Figura 5 apresenta o espectro NIR das amostras sem nenhum pré-tratamento, sendo representado pela cor azul as amostras de malvarisco, na cor vermelha as amostras de boldo miúdo e pela cor verde as amostras do boldo do Brasil.

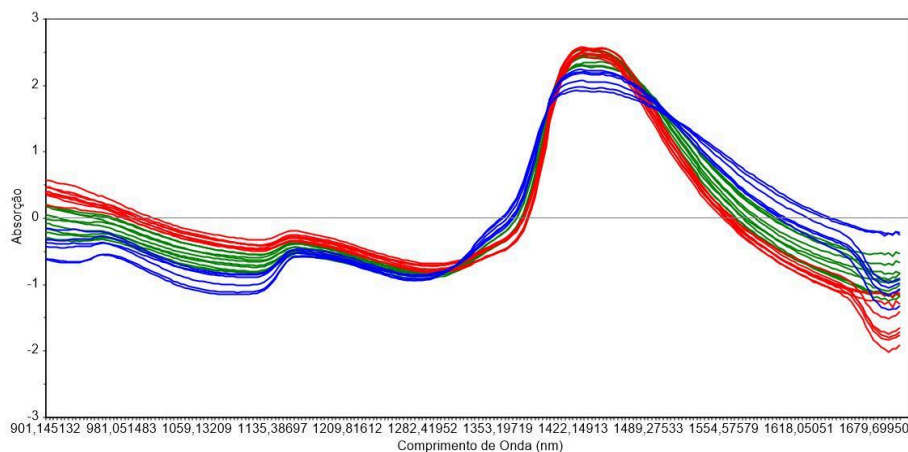
Figura 5 – Espectro NIR das amostras de boldo sem pré-tratamento



Fonte: Autora (2024).

Na Figura 6, é apresentado o espectro das amostras com aplicação da SNV. Comparado com o espectro inicial (Figura 5), observa-se que os espectros das amostras possuem o mesmo padrão, eliminando a diferença da linha de base, corrigindo outras variações que não são de absorção molecular.

Figura 6 – Espectro NIR das amostras de boldo com pré-tratamento com SNV



Fonte: Autora (2024).

No Quadro 2 é apresentado mais detalhadamente as bandas de absorção que diferenciam as espécies analisadas.

Quadro 2 – Bandas de absorção encontradas e sua interpretação

Bandas de absorção (nm)	Interpretação
950 - 970	C-H de hidrocarbonetos, O-H de carbonila, O-H de fenóis (óleos essenciais, fenólicos e glicolipídeos)
1150	C-H de hidrocarbonetos aromáticos (fenólicos)
1160 - 2010	C-H de hidrocarbonetos alifáticos (glicolipídeos)
1320 - 1360	bandas de combinação de C-H alifáticos (óleos essenciais e glicolipídeos)
1400 - 1420	O-H da água
1450 - 1690	Região de absorção C=O de carbonila, N-H amins e O-H (óleo essenciais e glicolipídeos)

Fonte: Autora (2024).

As folhas de boldo contém entre 0,4 e 0,5% de alcalóides pertencentes à classe dos benzoquinolínicos, sendo a boldina o principal alcalóide, representando cerca de 12 a 19% do conteúdo total de alcalóides (O'Brien *et al.*, 2006). Os alcalóides são um conjunto de compostos pertencentes ao grupo das amins cíclicas, que apresentam em sua estrutura anéis heterocíclicos contendo nitrogênio.

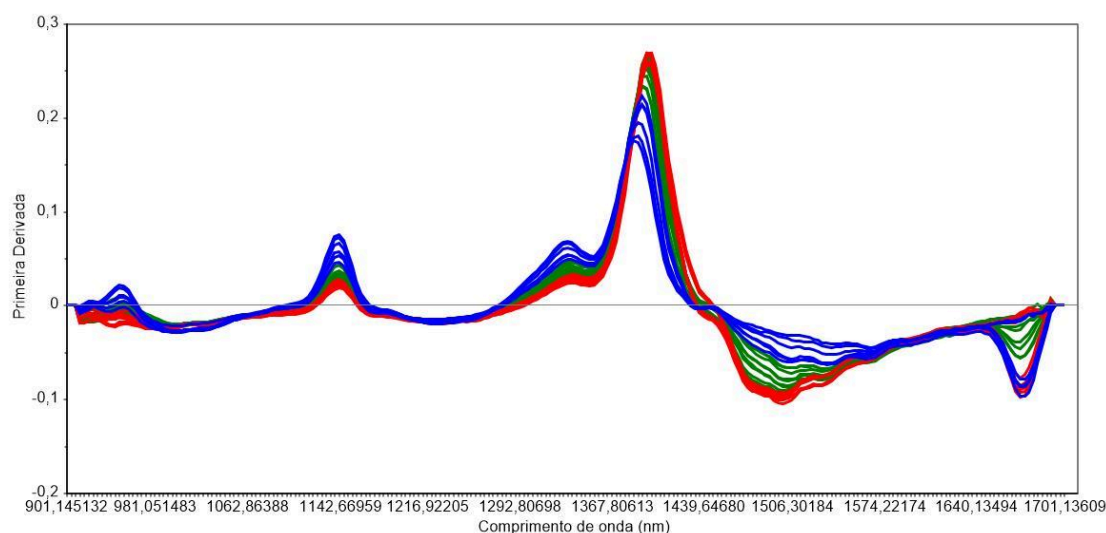
O estudo do pré-tratamento mais eficiente foi realizado com aplicação dos métodos de tratamento espectral separadamente e combinado, segundo o Quadro 1, com a descrição do resultado obtido em cada experimento.

Quadro 1 – Avaliação dos resultados em relação aos pré-tratamentos dos dados espectrais

Pré-tratamento	Resultado
SNV	PC1 95%, separação total das amostras em relação às espécies
SNV + 1º derivada	PC1 94%, separação total das amostras e das cidades
MSC	PC1 100%, com separação das amostras apenas pela umidade
1º derivada	PC1 95%, não houve separação total das amostras por espécies

Fonte: Autora (2024).

A discussão dos resultados será feita baseada na PCA obtida pelo pré-tratamento SNV com primeira derivada, pois este apresentou distinção das amostras por espécies e por localidade, conforme apresentado na Figura 7.

Figura 7 – Espectro NIR das amostras de boldo com pré-tratamento de SNV com primeira derivada Savitzky-Golay

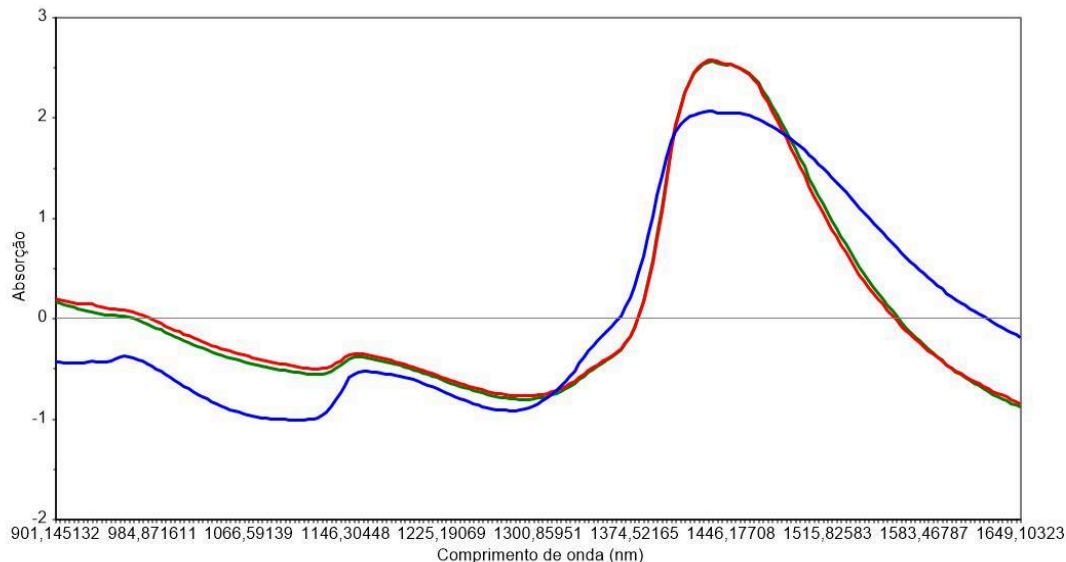
Fonte: Autora (2024).

Aplicando a primeira derivada combinada com o SNV, resultou no espectro apresentado na Figura 7. Os espectros foram alterados matematicamente, com posicionamento em torno do zero às regiões dos espectros com os mesmos valores

de absorção, e evidenciando as regiões com variações de absorção nos respectivos comprimentos de onda que possuem absorção molecular.

A Figura 8, apresenta o espectro NIR das três variedades do boldo estudadas. É possível observar que o boldo miúdo e o boldo do Brasil são bem similares, já o malvarisco se diferencia das outras duas espécies no perfil do espectro, dado a forma de absorção molecular diferente das demais. Um fator que evidencia isso é a quantidade de água presente nas amostras. O pico de absorção da água no infravermelho próximo aparece em torno de 1400 nm, a amostra do malvarisco é bem menor, e a largura da banda é muito maior, devido a maior absorção molecular na região de 1.500 nm. As bandas em torno de 950 nm e 1.200 nm também apresentaram diferenças significativas, sendo verificado maior absorção no espectro da amostra de malvarisco. A diferença nas intensidades de absorção pode estar relacionada à composição química específica de cada espécie de boldo.

Figura 8 – Espectro NIR das três espécies estudadas: Malvarisco (cor azul), Boldo Miúdo (cor verde) e Boldo do Brasil (cor vermelha).

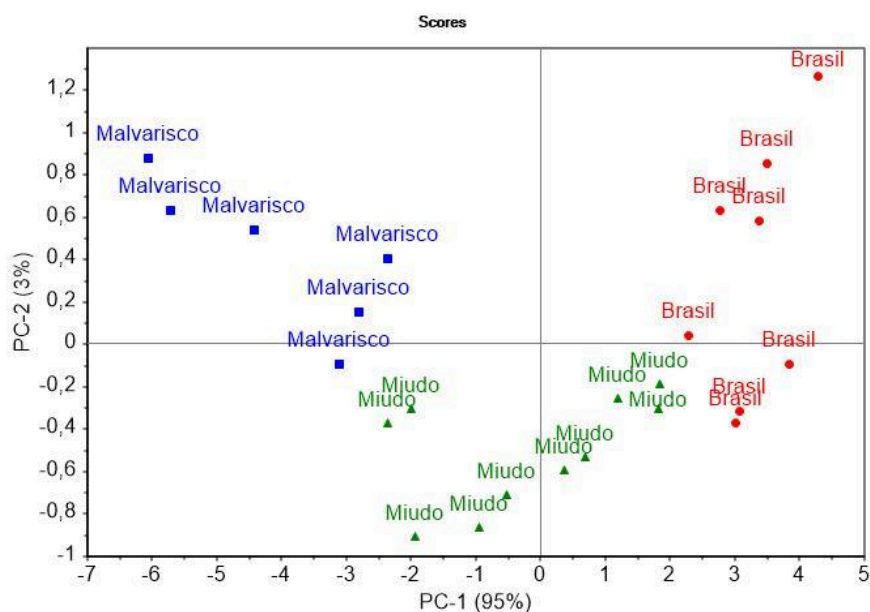


Fonte: Autora (2024).

Entre 1400 nm - 1420 nm, é onde ocorre a principal diferenciação. O boldo do Brasil (vermelho) tem a absorção mais intensa, seguido pelo boldo miúdo (verde) e, por último, o malvarisco (azul). A absorção mais intensa do boldo do Brasil nessa região pode sugerir uma maior concentração de compostos que absorvem nessa faixa, como a água.

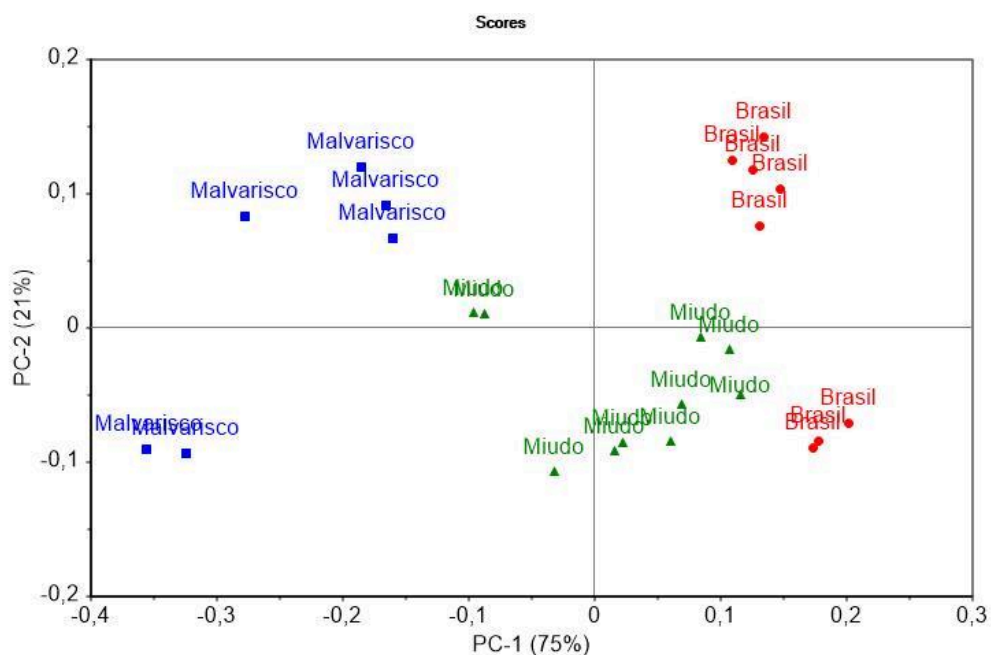
As Figuras 9 e 10 representam a PCA dos espectros das amostras de boldo com diferentes pré-tratamentos, a Figura 10 com apenas SNV e Figura 11 com pré-tratamento SNV e 1ª derivada Savitzky-Golay.

Figura 9 – Gráfico dos escores da PCA com o pré-tratamento SNV, com classificação das espécies estudadas: malvarisco (cor azul), boldo miúdo (cor verde) e boldo do Brasil (cor vermelha).



Fonte: Autora (2024).

Figura 10 – Gráfico dos escores da PCA com o pré-tratamento SNV e primeira derivada, com classificação das espécies de boldo

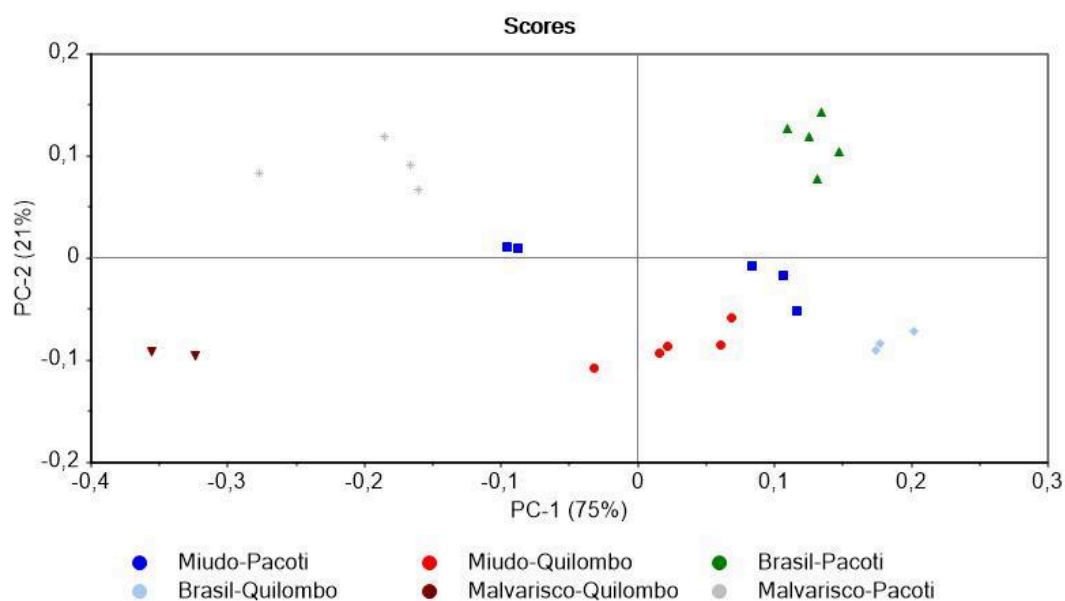


Fonte: Autora (2024)

Observando mais atentamente a Figura 10, verificou-se que dentro da classificação das variedades do boldo há a existência de uma separação em dois subgrupos. Assim, com nova classificação da localidade e da coleta das amostras, verificou-se a classificação distinta entre as variedades e a localidade da coleta, conforme Figura 11.

As amostras de boldo Malvarisco coletadas em Pacoti foram projetadas no 1º quadrante, às amostras de malvarisco coletadas no Quilombo no 4º quadrante. As amostras do boldo miúdo coletadas na cidade de Pacoti foram projetadas ao centro de forma dispersa, entre 1º, 3º e 4º quadrante. As amostras do boldo do Brasil foram projetadas nos 2º e 3º quadrantes.

Figura 11 – Escores da PCA com pré-tratamento SNV com primeira derivada com marcação das variedades do boldo e sua localidade



Fonte: Autora (2024)

Na Figura 11, temos a distinção das amostras tanto pela espécie quanto pela localidade. Nota-se que as espécies coletadas em Pacoti se concentraram mais na parte superior, enquanto que as espécies coletadas no Quilombo se concentraram na parte inferior. Esse fenômeno pode ter sido causado tanto pela composição do solo das duas regiões ou pela diferença de dias entre a coleta das amostras e a obtenção dos dados espectrais, que para as amostras de Pacoti foi de um dia e para as amostras do Quilombo os dados foram obtidos no mesmo dia da coleta.

5 CONCLUSÃO

O microNIR se mostrou adequado para esse estudo, pois aplicado junto às técnicas quimiométricas, conseguiu diferenciar as amostras tanto pela espécie quanto pela localidade em que foram coletadas.

Assim, o melhor pré-tratamento da PCA se deu pelo uso da SNV com primeira derivada, mostrando eficiência de 94%.

Também foi possível diferenciar as bandas de absorção que diferem as espécies analisadas, sendo elas: a região de 950 nm - 970 nm; 1150 nm; 1160 nm - 2010 nm; 1320 nm - 1360 nm; 1400 nm - 1420 nm e; 1450 nm - 1690 nm.

6 REFERÊNCIAS

ALMEIDA, M. Z. Plantas Medicinais. 3. ed. Salvador: EDUFBA, 2011. 221 p. ISBN 978-85-232-1216-2. Disponível em: <<http://books.scielo.org>>. Acesso em: 06 de jun. de 2024.

DE SOUSA, Luana Mateus. Guardiões da memória: um estudo na Serra do Evaristo sobre os aspectos semelhantes entre cultura africana e brasileira. **Revista Brasileira de Meio Ambiente**, v. 8, n. 4, 2020.

FERNANDES, José Martins; LOPES, Célia Regina Araújo Soares; ALMEIDA, Anderson Alex Sandro Domingos de. Morphology of medicinal species of cultivated boldo in Brazil. *Research, Society and Development*, v. 10, n. 7, p. e22610715824, 2021.

FERREIRA, Márcia Miguel Castro. **Quimiometria - Conceitos, Métodos e Aplicações**. Campinas, SP: Editora da Unicamp, 2015.

FIABANI, Adelmir. Os novos quilombos: luta pela terra e afirmação étnica no Brasil. 2008.

FIRMANI, P. et al. Authentication of “Avola almonds” by near infrared (NIR) spectroscopy and chemometrics. *Journal of Food Composition and Analysis*, v. 82, n. April, p. 103235, 2019a.

HARRIS, Daniel C. – Explorando a Química Analítica - Ed. LTC, 4ª. Edição, 2011 - Rio de Janeiro – RJ.

HOLLER, F. J.; SKOOG, D. A.; CROUCH, S. R. Princípios de Análise Instrumental. 6. ed. Porto Alegre: Bookman, 2009.

LORENZI, H.; MATOS, F.J.A. Plantas medicinais no Brasil nativas e exóticas. Nova Odessa: Instituto Plantarum, 2002.

MISHRA, Puneet; BIANCOLILLO, Alessandra; ROGER, Jean-Michel; MARINI, Federico; RUTLEDGE, Douglas N. New data preprocessing trends based on ensemble of multiple preprocessing techniques. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, v. 132, 2020. Disponível em: <https://hal.inrae.fr/hal-02968798v1/file/Mishra2_2020.pdf>. Acesso em: 08 de jul. de 2024.

MISINFUSIONES. **Guía completa sobre el boldo: origen, tipos, usos, propiedades y contraindicaciones**. Disponível em: <<https://www.misinfusiones.com/2023/05/guia-completa-sobre-el-boldo-origen.html>>. Acesso em: 08 de jul. de 2024.

MORGANO, M. A.; PAGEL, A. P.; FERRÃO, M. F.; FERREIRA, M. M. C. Determinação simultânea de cafeína, ácido clorogênico e trigonelina em café cru utilizando métodos multivariados de análise e espectroscopia no infravermelho

próximo. In: ENCONTRO NACIONAL DE QUÍMICA ANALÍTICA. Campinas, SP. 2001.

MOURA, Clóvis. Quilombos: resistência ao escravismo. 5. ed. Teresina: EdUESPI, 2021.

O'Brien P, Carrasco-Pozo C, Speisky H 2006. Boldine and its antioxidant or health-promoting properties. Chem Biol Interactions 159: 1-17.

PAULA, Anna Bárbara Fernandes de. A proteção dos conhecimentos tradicionais associados à biodiversidade. **Rev. Fund. Esc. Super. Minist. Público Dist. Fed. Territ.**, Brasília, v. 12, Edição Especial, p. 07-62, 2004. Disponível em: <https://escolamp.org.br/revistajuridica/revista_monografias_tx01.pdf>. Acesso em: 04 de jul. de 2024.

SIMÕES, C.M.O.; MENTZ, L.A.; SCHENKEL, E.P.; IRGANG, B.E.; STEHMANN, J.R. Plantas da Medicina Popular no Rio Grande do Sul. 3.ed. Porto Alegre: UFRGS, 1989. p. 9-20. Disponível em: <<https://saude.rs.gov.br/upload/arquivos/carga20190154/17115411-e-book-plantas-medicinais.pdf>>. Acesso em:

SKOOG D. A. Fundamentos de Química Analítica. [s.l: s.n.]. v. 15

TEIXEIRA, Enise Barth. A análise de dados na pesquisa científica: importância e desafios em estudos organizacionais. **Desenvolvimento em questão**, v. 1, n. 2, p. 177-201, 2003.

TEORIA OMNIS NIR. Manual do Produto. 8.0600.8101PT / v5 / 2024-02-09.