TEOR DE QUERCETINA E RUTINA EM POLPAS DE JUÇARA E AÇAÍ POR ESPECTROFOTOMETRIA E QUIMIOMETRIA

Pedro Arthur Pereira Miranda[1], Tércio da Silva de Souza[2]. 1Instituto Federal do Espírito Santo (Ifes), Campus Vitória, pedroarthur.mirandaps@gmail.com. 2Instituto Federal do Espírito Santo (Ifes), Campus Vitória, tssouza@ifes.edu.br.

Resumo

O presente trabalho tem como objetivo desenvolver, validar e aplicar uma estratégia analítica baseada em espectroscopia de infravermelho (FTIR-ATR) associada à quimiometria (PCA e PLS) para a quantificação simultânea dos flavonóis rutina e quercetina em polpas comerciais congeladas de juçara (*Euterpe edulis*) e açaí (*Euterpe oleracea*). As polpas foram desidratadas e analisadas por FTIR, tendo seus dados comparados ao método de referência por espectrofotometria UV-Vis. O teor de extrato seco avaliado confirmou que as marcas comerciais cumprem o limite mínimo legal. A análise espectrofotométrica revelou heterogeneidade nos teores dos compostos entre as marcas, sendo a quercetina quantificada com maior sensibilidade. A análise exploratória (PCA) sobre os espectros pré-processados discriminou perfeitamente as amostras na região de impressão digital. A construção de modelos preditivos por PLS com seleção de variáveis (iPLS e VIP) foi altamente eficaz para a quercetina (r=0,887). Conclui-se que o método desponta como uma alternativa rápida, precisa e sustentável para o controle de qualidade na agroindústria. **Palavras-chave:** *Euterpe*. Flavonóis. Espectroscopia FTIR. Quimiometria. Controle de qualidade.

Área do Conhecimento: Ciências Exatas e da Terra / Ciências Agrárias

Introdução

A palmeira juçara (*Euterpe edulis*) e o açaizeiro (*Euterpe oleracea*) fornecem frutos ricos em compostos bioativos, destacando-se os flavonóis como a quercetina e a rutina. Tais compostos possuem robusta atividade antioxidante, anti-inflamatória e cardioprotetora (BARROSO et al., 2019; CARVALHO et al., 2022). O monitoramento desses analitos é vital para atestar a qualidade funcional das polpas, mas os métodos convencionais, como o HPLC, exigem preparo laborioso e alto consumo de solventes orgânicos (SIDDIQUI et al., 2017).

Técnicas espectroscópicas, sobretudo a espectroscopia no infravermelho com reflectância total atenuada (FTIR-ATR), despontam como alternativas rápidas e de baixo impacto ambiental. Entretanto, a interpretação de espectros em matrizes biológicas complexas requer o auxílio de ferramentas quimiométricas, como a Análise de Componentes Principais (PCA) e a Regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLS), para o contorno de problemas de sobreposição de bandas espectrais (FERREIRA, 2015; COSTA et al., 2025).

Desta forma, o presente estudo tem como objetivo desenvolver, validar e aplicar uma estratégia analítica limpa, baseada em espectroscopia FTIR-ATR e modelagem quimiométrica, para discriminar e quantificar rutina e quercetina em polpas de açaí e juçara. Os valores analíticos de predição foram balizados frente à técnica de referência espectrofotométrica (UV-Vis), visando viabilizar sua aplicação no controle de qualidade da indústria de alimentos.

Metodologia

Foram avaliadas cinco marcas comerciais de polpa congelada adquiridas na Grande Vitória-ES. O rendimento em extrato seco das polpas foi determinado gravimetricamente para verificação de conformidade segundo os Padrões de Identidade e Qualidade legais (BRASIL, 2018). As amostras foram então liofilizadas/secas a 60 °C, maceradas (tamis 16 mesh) e separadas em tubos.

Para as análises de referência, utilizou-se a espectrofotometria UV-Vis pelo método de complexação com cloreto de alumínio. O método baseou-se na extração assistida por ultrassom (30 min) a partir de 0,5 g de polpa pura e de polpa fortificada (2 a 7 μg g^{-1}) com padrões de rutina e quercetina (COSTA et

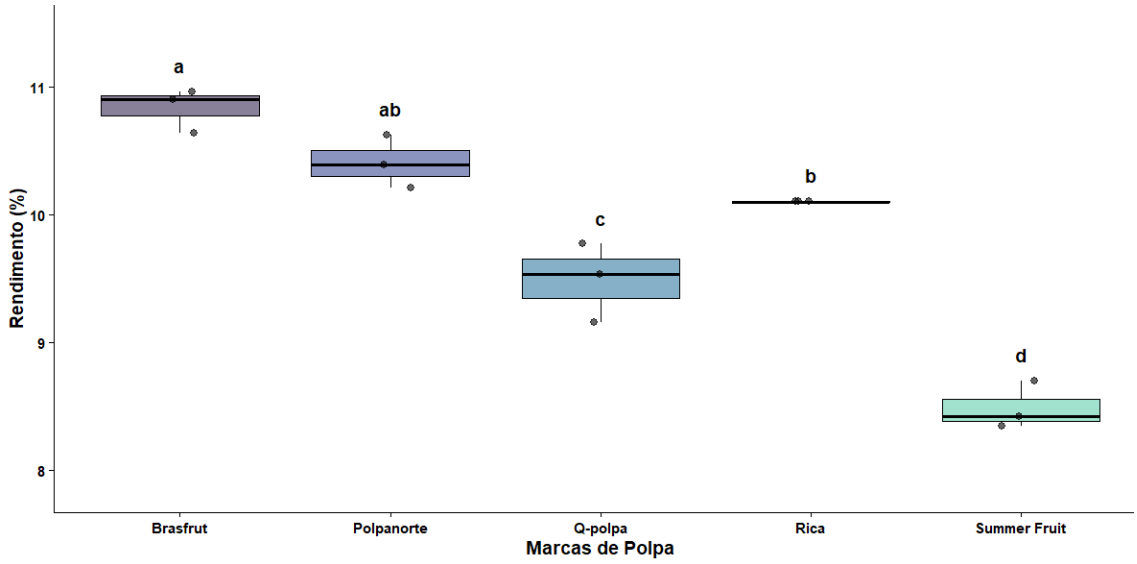
al., 2025). As leituras foram realizadas em espectrofotômetro (Thermo Scientific, Genesys 150) no comprimento de onda de 428 nm.

A obtenção das assinaturas espectroscópicas ocorreu em equipamento Agilent FTIR Cary 630 com módulo ATR (cristal de ZnSe). As leituras abrangeram a região de 4000 a 650 cm^{-1} (160 varreduras e resolução de 4 cm^{-1}). Os dados espectrais brutos foram pré-processados em ambiente R (versão 4.5.3) empregando-se correção SNV e filtro de Savitzky-Golay (primeira derivada, janela de 15 pontos, polinômio de grau 2) seguido da centralização na média. Os dados foram aplicados à análise exploratória (PCA) e modelagem quantitativa (PLS), selecionando-se as melhores faixas espectrais através dos algoritmos iPLS e VIP > 1,0.

Resultados

A avaliação do extrato seco revelou teores variando entre 8,35% (Summer Fruit) e 11,1% (Brasfrut), **conforme ilustra a Figura 1**. Constatou-se que todas as amostras enquadram-se dentro da margem estipulada pela legislação (entre 8% e 11%) para o açaí Tipo C.

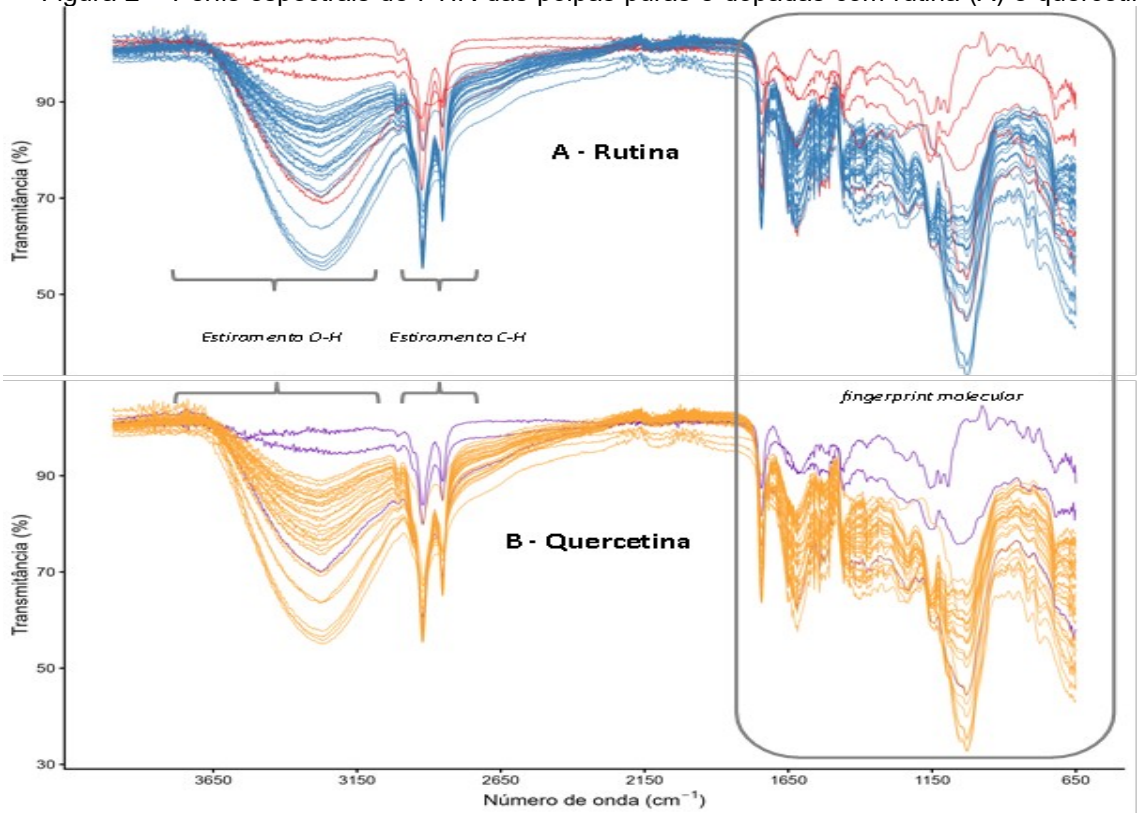
Figura 1 – Perfil de rendimento (%) e teor de extrato seco das polpas de açaí.



Fonte: Elaborado pelos autores (2026).

Na quantificação por UV-Vis, identificou-se alta heterogeneidade entre as marcas, com equivalentes variando de 10,00 a 26,80 mg g^{-1} para rutina, e de 2,25 a 7,41 mg g^{-1} para quercetina. As curvas de calibração para quercetina obtiveram coeficientes de determinação superiores (R^2 > 0,85) frente à rutina, fenômeno atribuído à melhor coordenação iônica da aglicona frente ao dissacarídeo (rutinose) presente na estrutura da rutina, o que afeta o rendimento e a leitura no UV-Vis. Os perfis espectrais evidenciando a impressão digital molecular das amostras puras e dopadas estão representados na **Figura 2**.

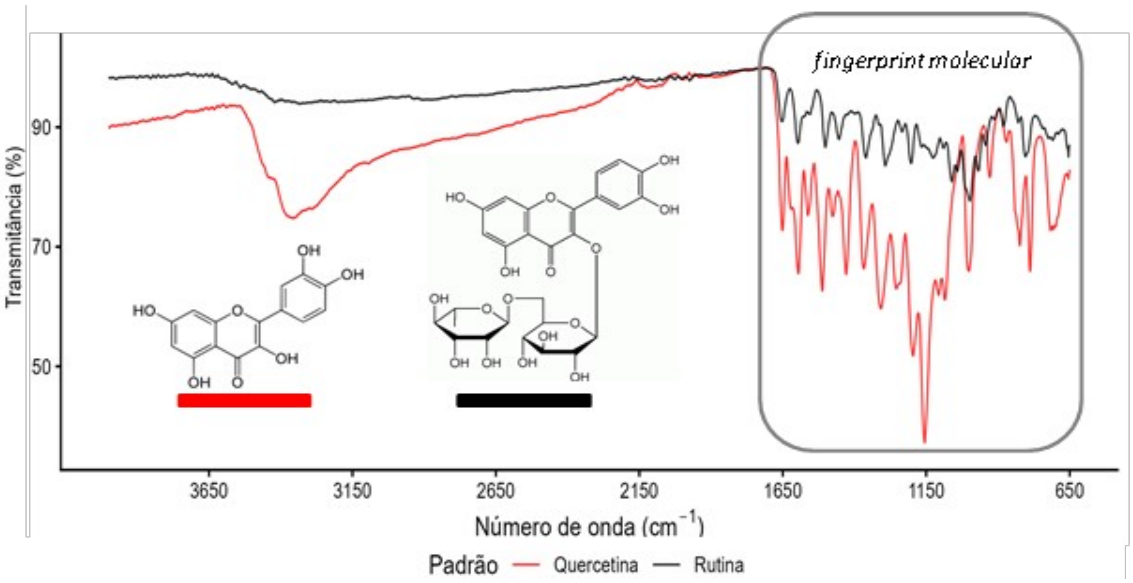
Figura 2 – Perfis espectrais de FTIR das polpas puras e dopadas com rutina (A) e quercetina (B).



Fonte: Elaborado pelos autores (2026).

Os espectros no infravermelho destacaram-se pela região de impressão digital (1700 a 650 cm^{-1}). As amostras exibiram absorções nas faixas de 3600-3000 cm^{-1} (estiramento O-H fenólico) e 1666 cm^{-1} (C=O conjugado). Na rutina, a densidade de bandas foi maior devido às ligações do açúcar constituinte (estiramentos C-O e C-O-C entre 1200 e 1000 cm^{-1}), **diferença estrutural que pode ser observada detalhadamente na Figura 3**.

Figura 3 – Comparação espectral por FTIR entre quercetina e rutina.

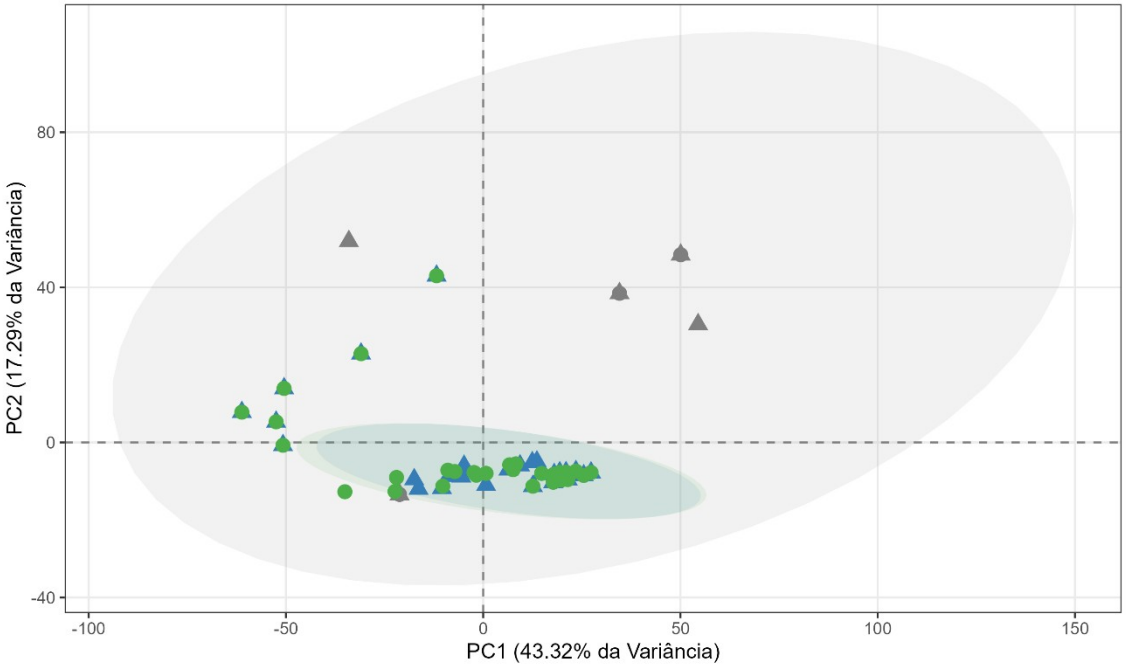


Fonte: Elaborado pelos autores (2026).

Discussão

O processamento computacional associado à PCA provou-se altamente discriminatório **(Figura 4)**. O componente PC1 separou perfeitamente as polpas enriquecidas com rutina daquelas com quercetina (explicando 43,32% da variância), com os gráficos de pesos (*loadings*) revelando que as vibrações das ligações glicosídicas e C=C aromáticas foram as responsáveis pelo agrupamento. A dispersão das amostras não aditivadas evidenciou a alta complexidade química inerente à matriz endógena das polpas.

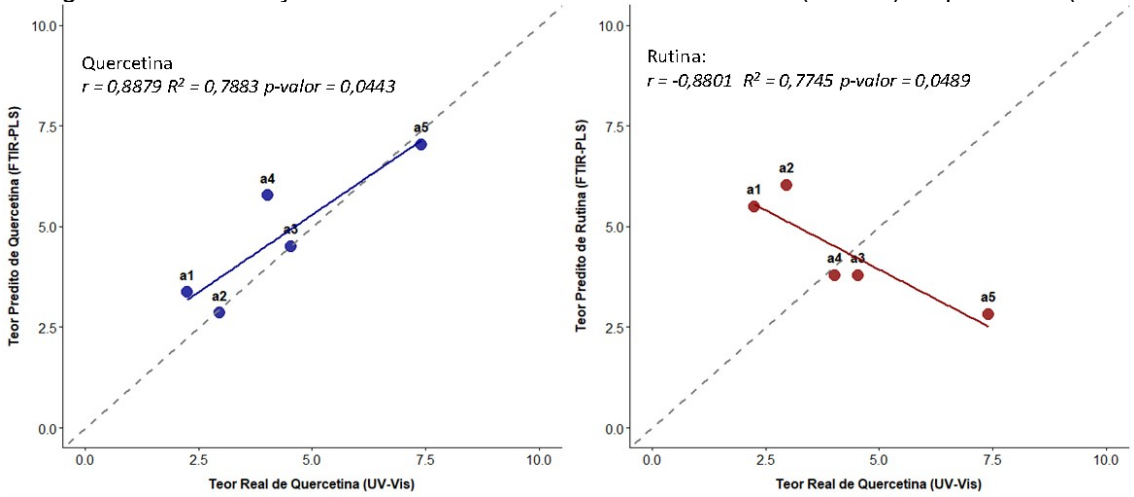
Figura 4 – Gráfico de escores (PCA) dos espectros FTIR-ATR das amostras



Fonte: Elaborado pelos autores (2026).

A modelagem por regressão PLS demonstrou a importância capital da seleção de variáveis. O uso do espectro completo redundou em predições falhas (R^2 de validação negativos). Contudo, a aplicação dos métodos iPLS e VIP elevou significativamente a precisão **(Figura 5)**: o modelo otimizado para quercetina isolou apenas as janelas vibracionais essenciais (650–815, 982–1146 e 2806–3136 cm^{-1}), consolidando uma correlação excelente e estatisticamente significativa entre os valores espectrofotométricos de referência e os previstos pelo FTIR (r = 0,887; p = 0,044; R^2 = 0,788). O modelo calibrado para rutina sofreu maiores perdas preditivas indicando que as bandas do flavonoide glicosilado exibem interações competitivas ou efeito de diluição cruzada face aos constituintes naturais da polpa.

Figura 5 – Correlação linear entre os teores de referência (UV-Vis) e previstos (FTIR-PLS).



Fonte: Elaborado pelos autores (2026).

Conclusão

A associação do método FTIR-ATR com as análises multivariadas PCA e PLS consolidou-se como uma abordagem altamente viável, não destrutiva e sustentável. Embora as propriedades físico-químicas das polpas exijam o aprimoramento pontual para flavonoides muito complexos (como a rutina), o modelo calibrado demonstrou alto poder de previsão analítica para a quercetina. Os resultados reforçam o elevado potencial da espectroscopia de bancada, validada por quimiometria, como alternativa instrumental de controle de qualidade na identificação de compostos bioativos da agroindústria de frutas.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com o apoio do Instituto Federal do Espírito Santo (Ifes), por meio de financiamento editalício (Edital 04/2025 - PIVIC-Jr).

Referências

BARROSO, M. E. S. et al. Phytochemical profile of genotypes of Euterpe edulis Martius–Juçara palm fruits. **Food Research International**, v. 116, p. 985-993, 2019.

BRASIL. Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento. **Instrução Normativa SDA/MAPA nº 37, de 1º de outubro de 2018**. Estabelece os parâmetros analíticos complementares para sucos e polpas de frutas. Diário Oficial da União, Brasília, DF, 3 out. 2018.

CARVALHO, L. M. J. de; ESMERINO, A. A.; CARVALHO, J. L. V. de. Jussaí (Euterpe edulis): a review. **Food Science and Technology**, v. 42, p. e08422, 2022.

COSTA, N. B. da et al. Determinação do flavonoide quercetina em extratos de planta por infravermelho (ATR-FTIR) e quimiometria. **Química Nova**, v. 10, p. e-20250210, 2025.

FERREIRA, M. M. C. **Quimiometria: conceitos, métodos e aplicações**. Campinas: Editora da UNICAMP, 2015. 496 p.

SIDDIQUI, M. R.; ALOTHMAN, Z. A.; RAHMAN, N. Analytical techniques in pharmaceutical analysis: A review. **Arabian Journal of Chemistry**, v. 10, p. S1409-S1421, 2017.