

AUTENTICAÇÃO DO ÓLEO ESSENCIAL DE PAU-ROSA POR ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO E MODELAGEM INDEPENDENTE FLEXÍVEL POR ANALOGIA DE CLASSE

Lilian Rodrigues Braga¹; Tereza Cristina Monteiro Pastore²; Daniele Cristina Gomes da Cunha Kunze¹; Floriano Pastore Júnior¹, Alessandro César de Oliveira Moreira², Priscila Veras dos Anjos Lopes¹, Caroline Schmaedeck Lara³, Jez Willian Batista Braga^{1,4}.

1 - Instituto de Química, Universidade de Brasília, Brasília, DF.

2 - Laboratório de Produtos Florestais, Serviço Florestal Brasileiro, Brasília, DF.

3 - Instituto Nacional de Pesquisa da Amazônia, Manaus, AM.

4 - Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia em Bioanálítica, Campinas, SP.

*e-mail: lilianrodribraga@gmail.com

Introdução: O óleo essencial de pau-rosa é um produto florestal de alto valor agregado, extremamente apreciado no mercado nacional e internacional por ter uma fragrância única, doce, amadeirada e rica em linalol¹. O óleo é obtido da espécie arbórea *Aniba rosiodora* Ducke^{2,3}, nativa da Floresta Amazônica e atualmente ameaçada de extinção devido à exploração por décadas. A *A. rosiodora* faz parte do Anexo II da Convenção sobre Comércio Internacional de Espécies Ameaçadas de Fauna e Flora Selvagens (CITES) e tem comércio e exportação de seu óleo essencial permitidos apenas em áreas autorizadas⁴. Tendo em vista o grande interesse comercial e as restrições de exploração da espécie, torna-se necessário desenvolver métodos de identificação e determinação de autenticidade e grau de pureza eficazes. **Objetivo:** Este estudo propõe um método para a análise direta e rápida do óleo essencial de pau-rosa usando espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier (FTIR) e modelagem independente flexível por analogia de classe (SIMCA). **Metodologia:** A amostragem foi realizada em diferentes estados brasileiros, abrangendo indústrias, pequenas cooperativas, produtores locais e produtos comerciais. As medições de reflectância total atenuada no FTIR foram realizadas em triplicata e sem tratamento da amostra. Todos os espectros obtidos passaram por pré-processamento de padronização normal de sinal (SNV) e primeira derivada pelo algoritmo Savitzky-Golay. O modelo SIMCA foi criado utilizando pré-processamento de *centering*, 2 componentes principais e o grupo de treinamento consistiu em 2/3 das amostras consideradas óleo de pau-rosa puro pela caracterização por análise GC-MS (31 amostras) e 33 misturas preparadas entre elas de forma a obter uma validação representativa. Já o grupo de validação integrou o 1/3 restante daquelas consideradas puras (16 amostras), mais 28 misturas e os espectros de outras 83 amostras adquiridas que não foram caracterizadas como óleo de pau-rosa puro pelo GC-MS. **Resultados:** O método é rápido, de custo relativamente baixo para determinar a autenticidade de amostras de óleo de pau-rosa e com 100% de eficiência na análise de amostras de diferentes origens. Entre as amostras comerciais adquiridas na internet ou em mercados locais, a maioria foi considerada não-autêntica, apresentando diferentes perfis químicos ou adulterações, destacando a importância de análises *in situ*. **Conclusão:** A análise é não-destrutiva, sem resíduo químico e requer cerca de 200µL de amostra, tornando o método ambientalmente atrativo para uso em laboratórios de controle de qualidade e para fins de inspeção por órgãos reguladores para atender aos requisitos da CITES.

Palavras-chave: FTIR; quimiometria; SIMCA; *Aniba rosiodora* Ducke; falsificação.

¹ <https://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/10412905.2012.676770>

² <https://www.tropicos.org/name/17802277>

³ <https://www.iapt-taxon.org/historic/2012.htm>.

⁴ https://www.unodc.org/documents/Wildlife/Guide_Timber.pdf