

Análise de espectro ATR-FTIR de *Pinus Pinea* e *Pinus Brutia*

Esta análise serve como exemplo do protocolo seguido para a análise dos espectros dos amieiros, uma vez que já sabíamos que se conseguiam detetar diferenças entre estas duas espécies de pinheiros.

Nota: as agulhas analisadas foram recolhidas dos pinheiros plantados no arboreto do ISA.

Foram recolhidas agulhas de 15 pinheiros das duas espécies e um total de 10 agulhas por pinheiro.

Visualização dos espectros

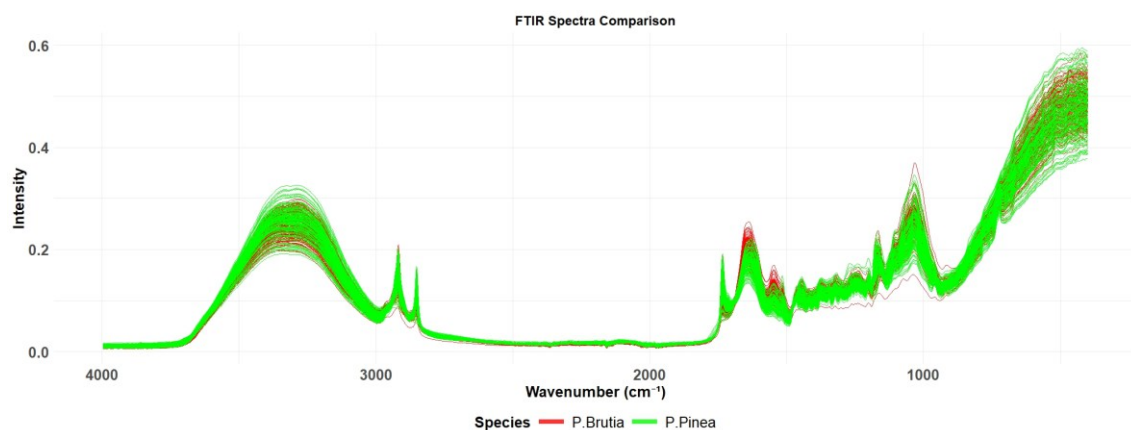


Figura 1- Espectros de agulhas de 30 pinheiros (15 *P. Pinea* + 15 *P. Brutia*).

Análise de componentes principais dos espectros (dados brutos)

Esta análise foi realizada usando a totalidade da informação dos espectros (Figura 1) sem seleção de nenhuma área.

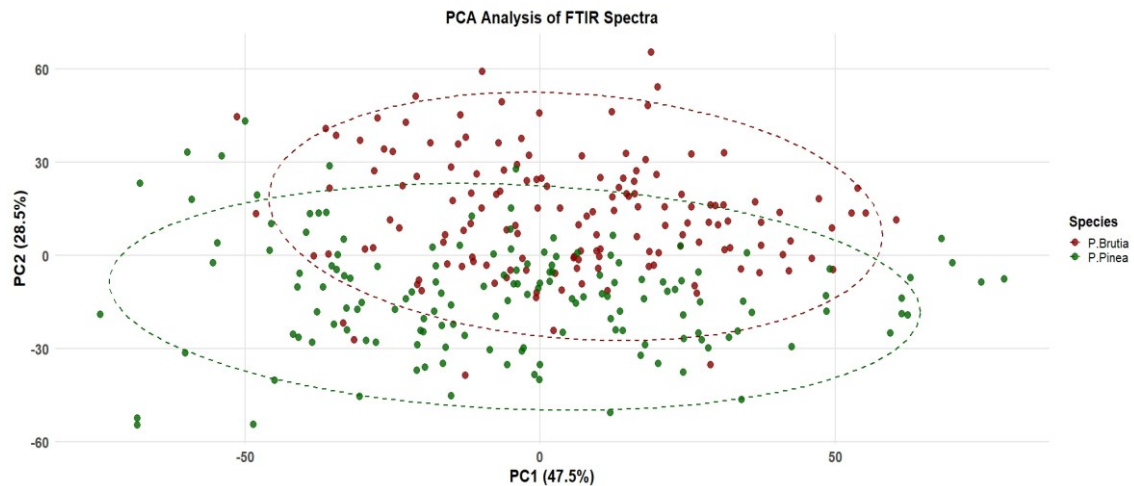


Figura 2- Análise de componentes principais da totalidade dos valores de intensidade obtidos.

Os mesmos dados brutos foram analisados usando a **segunda derivada**. A segunda derivada é aplicada em espectros FTIR para melhorar a resolução espectral e eliminar interferências. Enquanto os dados brutos podem conter variações indesejadas da linha de base (baseline) e bandas sobrepostas, a transformação pela segunda derivada realça as características químicas relevantes ao destacar mudanças na curvatura do sinal. Essa técnica ajuda a separar bandas próximas, suprime efeitos sistemáticos da preparação da amostra e revela pequenas variações estruturais que permaneceriam ocultas nos espectros originais (Figura 3).

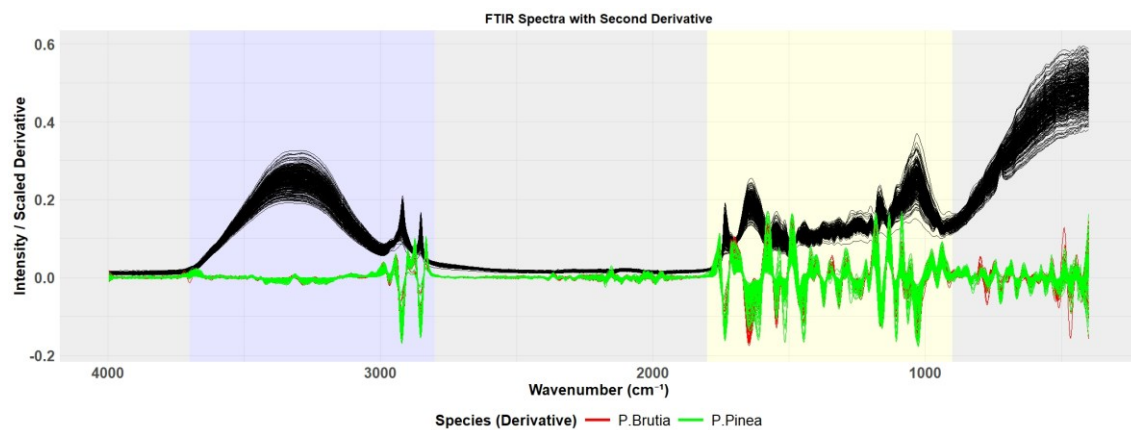


Figura 3- Comparação dos espectros originais e da segunda derivada dos mesmos.

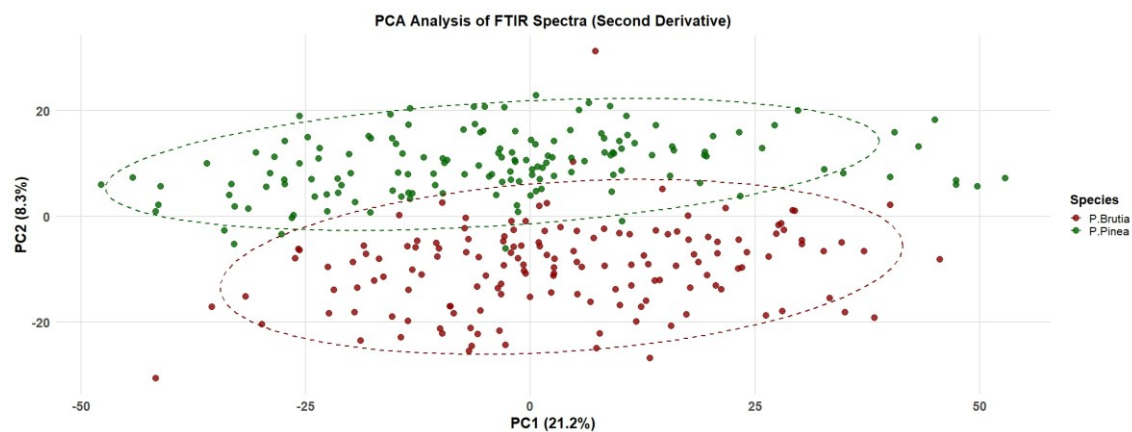


Figura 4- Análise de componentes principais da segunda derivada da totalidade dos valores de intensidade obtidos.

Seleção de duas regiões

Foram selecionadas as duas regiões que nos fornecem mais informação a azul (wavenumber 2800 até 3700 cm^{-1}) a região das ligações simples C-H e OH e a amarelo (wavenumber 900 até 1800 cm^{-1}) a região fingerprint, ligações C-C, C-O e C-H.

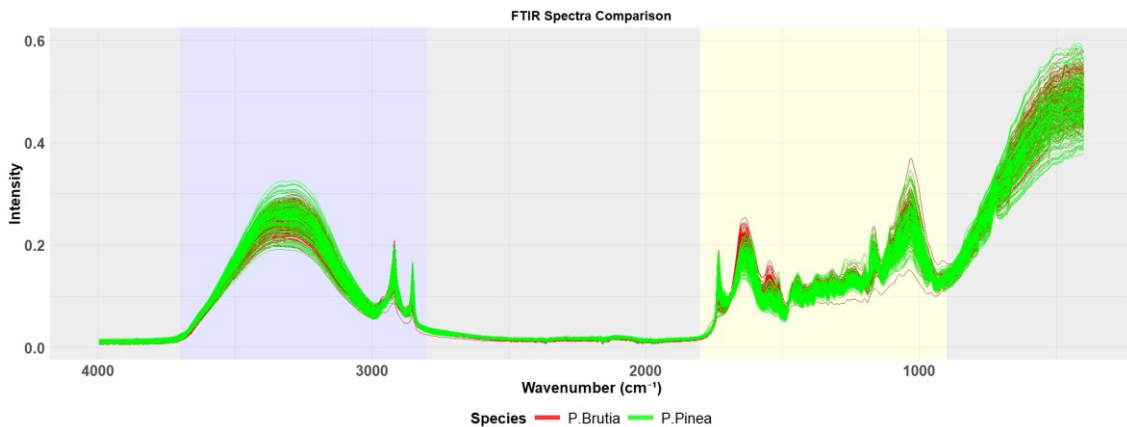


Figura 5- Regiões selecionadas dos espectros de agulhas de 30 pinheiros (15 *P. Pinea* + 15 *P. Brutia*).

Análise de componentes principais dos espectros (dados selecionados)

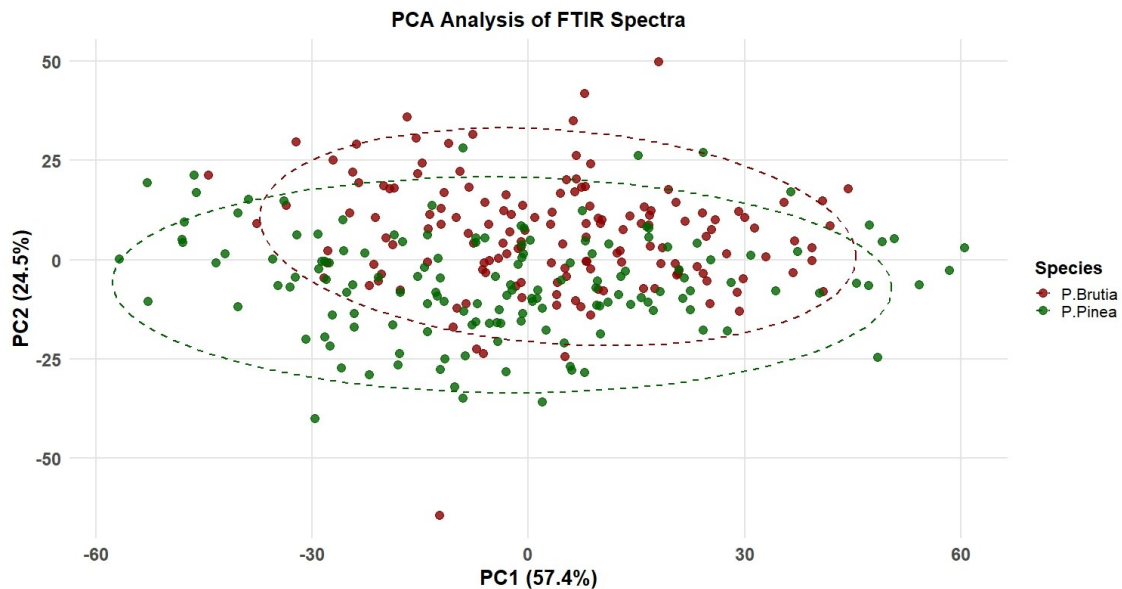


Figura 6- Análise de componentes principais dos valores de intensidade obtidos nas regiões selecionadas.

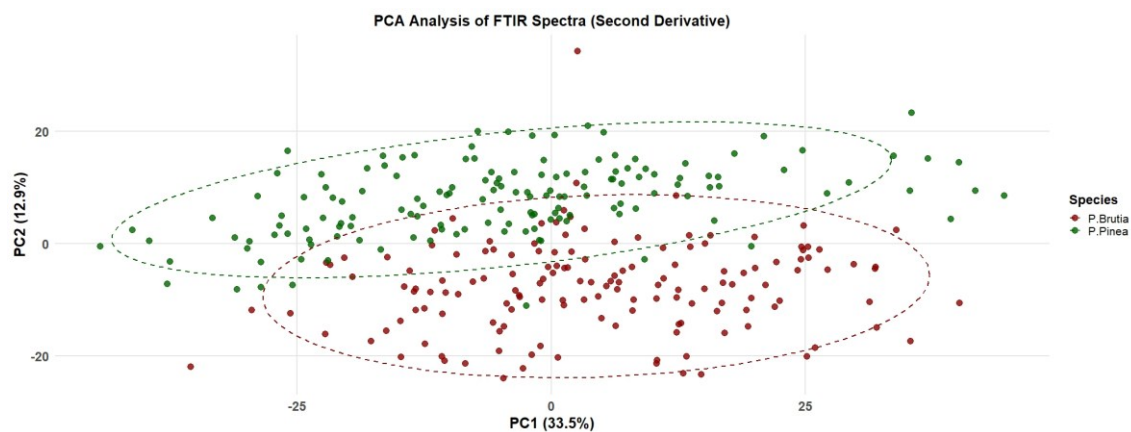


Figura 7- Análise de componentes principais dos valores da segunda derivada obtidos nas regiões selecionadas.

Conclusão final:

O uso da segunda derivada nos espectros FTIR melhora a capacidade de separação entre as espécies, mesmo que à custa de menor variância explicada nos primeiros PCs. Isso sugere que o pré-processamento com segunda derivada é mais eficaz para fins de classificação ou diferenciação entre *P. brutia* e *P. pinea* neste conjunto de dados.

Análise de espectro ATR-FTIR de *Alnus lusitanica* e *Pinus glutinosa*

O mesmo tipo de análise realizado foi feito para os espectros recolhidos das duas espécies de amieiros. Foram medidos espectros de 3 folhas por amieiro num total de 13 amieiros por espécie.

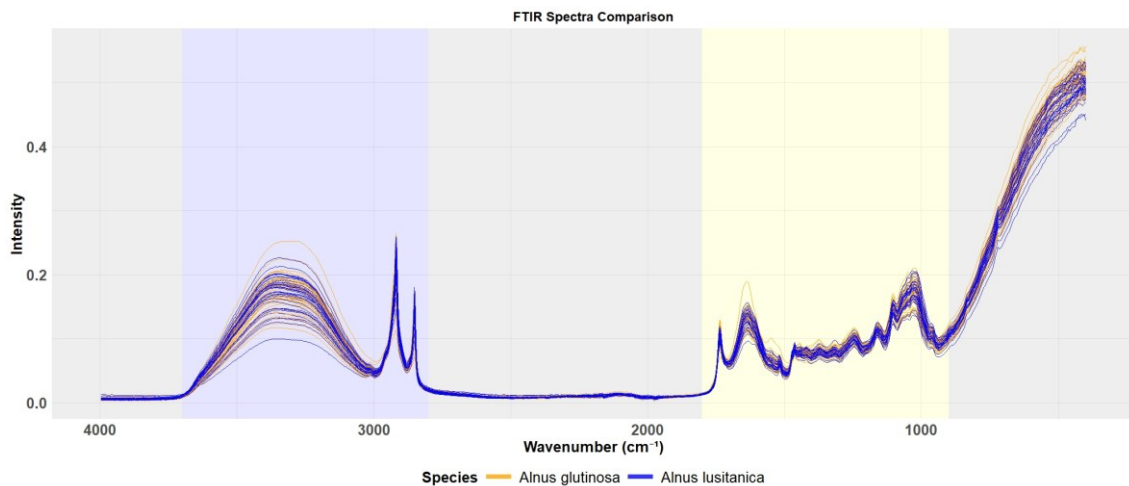


Figura 8- Regiões selecionadas dos espectros de folhas de 26 amieiros (13 *Alnus glutinosa* + 13 *Alnus lusitanica*).

Análise de componentes principais dos espectros (dados brutos)

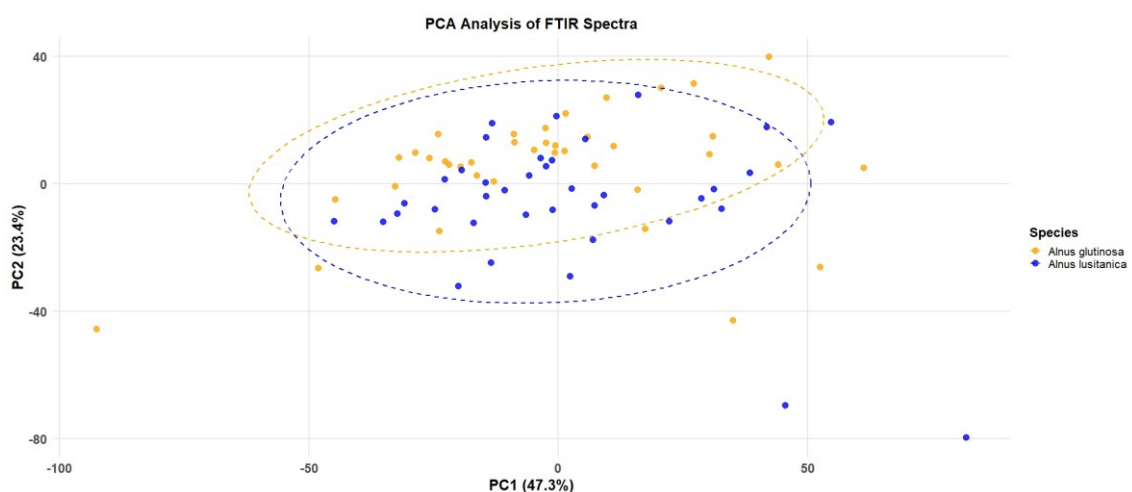


Figura 9- Análise de componentes principais da totalidade dos valores de intensidade obtidos.

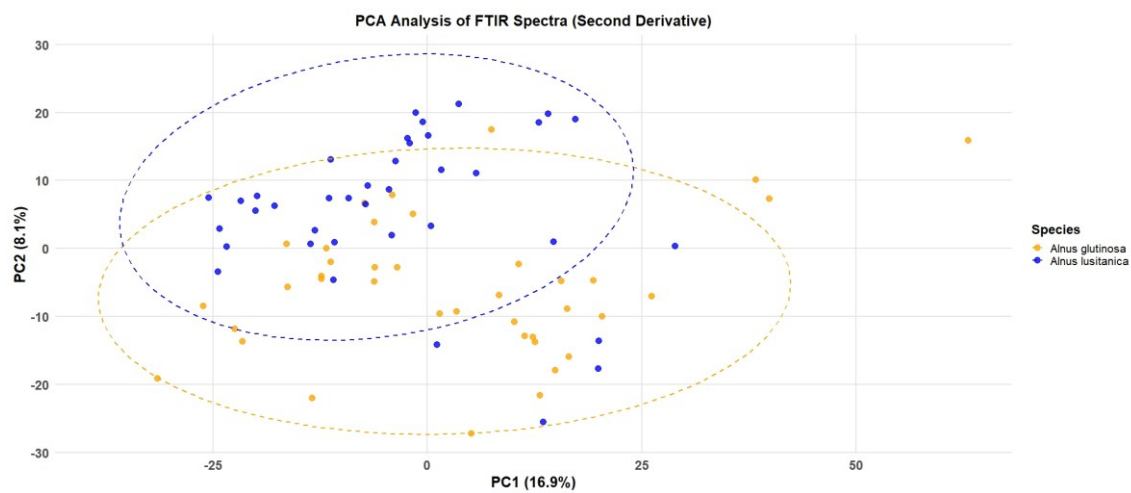


Figura 10- Análise de componentes principais da segunda derivada da totalidade dos valores de intensidade obtidos.

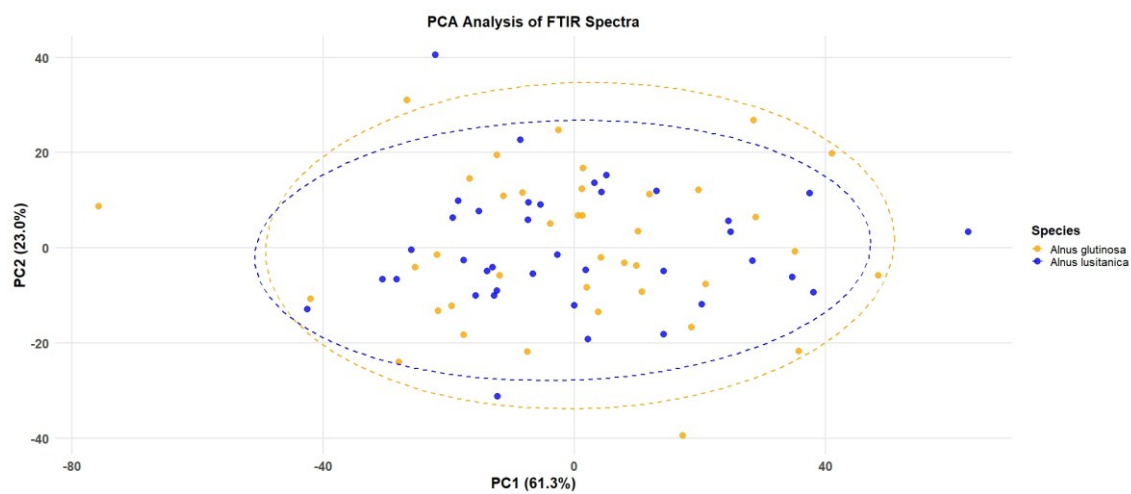


Figura 11- Análise de componentes principais dos valores de intensidade obtidos nas regiões selecionadas.

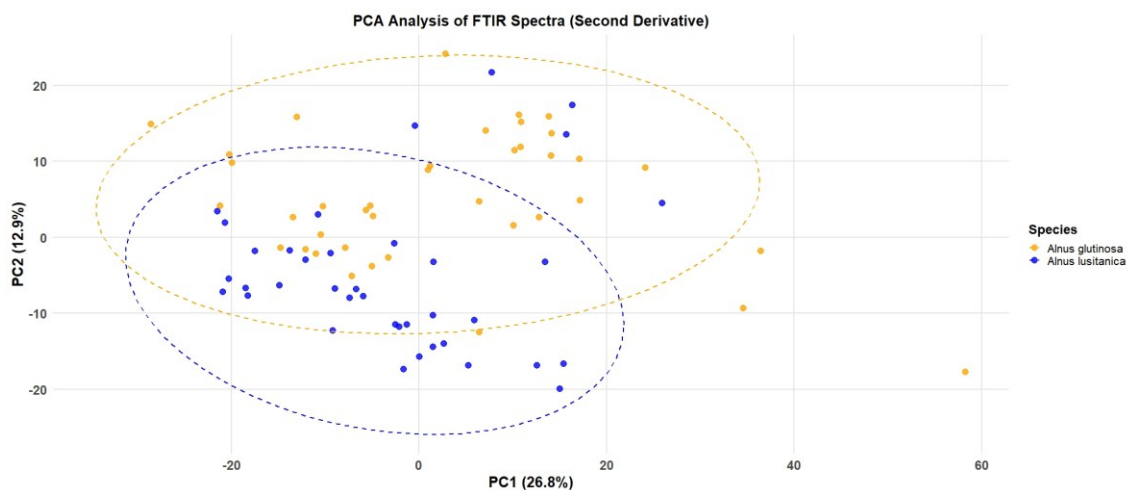


Figura 12- Análise de componentes principais dos valores da segunda derivada obtidos nas regiões selecionadas.

Conclusão final:

O uso da segunda derivada nos espectros FTIR melhora ligeiramente a capacidade de separação entre as espécies, mesmo que à custa de menor variância explicada nos primeiros PCs. No entanto a separação das duas espécies é menos clara quando comparada com o exemplo das espécies dos pinheiros.