



## Aplicación de métodos quimiométricos en la investigación de productos naturales

Oscar Antonio Sánchez Aguirre<sup>1</sup>, Leticia Margarita Cano Asseleih<sup>1</sup>, Alberto Sánchez Medina<sup>1</sup> y Gerardo Sánchez González<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Veracruzana. oskar.aguirre92@gmail.com

La continua aparición de nuevas enfermedades ha motivado al hombre a buscar soluciones o paliativos para estos males, siendo el uso de plantas una de las mejores estrategias. El 80% de la población mexicana hace uso frecuente de la medicina tradicional para satisfacer o complementar sus necesidades médicas. Sin embargo, de las aproximadamente 3,000 a 4,500 plantas medicinales inventariadas, solamente se ha hecho análisis farmacológico del 5%. Por lo que, el estudio químico y biológico de las plantas medicinales es de suma importancia. La búsqueda de metabolitos secundarios con actividad biológica en extractos vegetales ha sido mediante ensayos biodirigidos, la cual es una herramienta valiosa y exitosa. No obstante, presenta algunos inconvenientes, se trata de un proceso repetitivo que consume una gran cantidad de material vegetal, recursos y tiempo. Así mismo, se ha visto la pérdida de la actividad biológica debido a la dilución de los metabolitos de interés debido al fraccionamiento realizado. Por esta razón, se ha buscado nuevas alternativas para buscar metabolitos secundarios activos en extractos vegetales y este ha sido mediante la aplicación de métodos quimiométricos.

La quimiometría es descrita como la interacción de métodos matemáticos y estadísticos en los procesos de medición química. Esta herramienta se ha desarrollado como consecuencia del cambio en los datos obtenidos con la aparición de nuevas técnicas analíticas además de microprocesadores. El surgimiento del pensamiento quimiométrico se produjo al darse cuenta de que las estadísticas univariadas tradicionales ya no eran suficientes para describir y modelar experimentos químicos.

Para la obtención de una mejor calidad en los procesos de separación en el análisis cualitativo y cuantitativo de las condiciones cromatográficas y espectroscópicas estas deben optimizarse en función de los objetivos analíticos particulares. Por lo que, deben definirse claramente factores importes y significativos como el disolvente, la fase móvil, el pH, y la temperatura de la columna que pudieran afectar los resultados de un análisis, así como, acercarse a la realidad química de una muestra.

El siguiente paso se trata de determinar la resolución o la calidad de separación medida en términos de respuesta y/o función de su optimización, seguida por el desarrollo de un modelo matemático o estadístico que describe esta relación entre los parámetros analíticos (espectroscópicos / cromatográficos) y las respuestas de los experimentos diseñados.

La quimiometría puede ser clasificada en dos categorías en análisis cualitativo y cuantitativo. El primero es el análisis de los componentes principales (PCA), su principal objetivo es reducir la dimensionalidad de los datos en un conjunto menor, de modo que los datos originales se transforman en nuevas variables (componentes principales) no correlacionadas entre sí (ortogonales), siendo estas nuevas variables una combinación lineal de variables originales. El segundo es el método de proyecciones parciales de mínimos cuadrados (OPLS) o también conocido como Proyección de Estructuras Latentes es una técnica multivariable supervisada, con la cual se puede describir una relación lineal entre la variable dependiente "y" (actividad biológica), con una o varias variables independientes X (perfiles metabólicos).