

Vantagens da Técnica de Imagem Hiperespectral para Determinação de Propriedades Globais em Borracha Natural Pré-Vulcanizada

Carlos Juliano da Silva*¹ (PG), Celio Pasquini¹ (PQ); *julianocjs@gmail.com

¹Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Química, Grupo de Instrumentação e Automação em Química Analítica - Campinas - SP

Palavras Chave: Borracha natural, propriedades reológicas, imagem hiperespectral, infravermelho próximo.

Introdução

Técnicas de Imagem Hiperespectral no Infravermelho Próximo por reflectância difusa (HI-NIR) são utilizadas normalmente em aplicações nas quais necessita-se de uma análise da amostra com resolução espacial. Dentre as áreas do conhecimento que têm empregado com sucesso a técnica HI-NIR encontram-se: a farmacêutica, a agrícola, de alimentos, de materiais e de objetos de interesse histórico e na área forense¹. Entretanto, a técnica IH-NIR pode se mostrar mais robusta mesmo em aplicações nas quais técnicas de imageamento, em princípio, não apresentariam vantagem sobre as técnicas de medidas convencionais (FT-NIR), como por exemplo, a determinação de propriedades e concentrações globais em sólidos.

O presente trabalho visa comparar as técnicas de FT-NIR e HI-NIR para determinação de viscosidade Mooney (VM) e plasticidade Wallace (Po, P30 e PRI) em amostras de borracha natural pré-vulcanizada, quando na presença de contaminantes. Para tanto, pequenos pedaços de folha de árvore (~0,65 cm²) foram colocados sobre a superfície das amostras de borracha (~24 cm²). Em seguida, foram adquiridos seus espectros NIR (1000 - 25000 nm) utilizando dois espectrofotômetros NIR com Transformada de Fourier, FT-NIR (1) (Bomem, modelo MB 164) e FT-NIR (2) (AIT, modelo Diamond 20) e um câmera hiperespectral (SisuChema, SWIR). Os espectros na presença do contaminante foram então utilizados para determinação da VM e PW por meio de modelos PLS previamente otimizados.

Resultados e Discussão

Os valores de viscosidade e plasticidade, na presença do contaminante, determinados para três amostras por meio dos modelos PLS foram comparados com os respectivos valores de referência. Os resultados foram então expressos como a diferença absoluta média (DAM) entre os valores de referência e os determinados por meio da espectroscopia NIR. A Tabela 1 contém o resumo dos resultados obtidos.

Tabela 1. Diferenças médias absolutas (DAM) entre os valores de referência e os determinados por meio da espectroscopia NIR.

Equipamento	DAM			
	VM	Po	P30	PRI (%)
FT-NIR(1)	51,3	5,3	29,1	71,6
FT-NIR(2)	15,4	10,8	6,9	30,9
HI-NIR	2,5	2,4	2,6	2,5

Pode-se verificar que os erros obtidos para HI-NIR são significativamente inferiores aos obtidos para FT-NIR. Os valores de DAM para a técnica de imagem estão de acordo com os valores de RMSEP dos modelos PLS previamente otimizados, que são de: 4,6; 3,0; 3,2 e 5,3, para, VM, Po, P30 e PRI, respectivamente. Em contrapartida, os diferenças obtidas para os dois equipamentos FT-NIR são muito superiores aos respectivos valores de RMSEP.

Além disso, a técnica de imagem apresenta a vantagem sobre as técnicas convencionais de possibilitar a identificação e eliminação dos espectros referentes ao contaminante. Com o auxílio do software Evince seleciona-se os scores correspondentes ao contaminante - após análise por PCA de todos os espectros (amostra + contaminante) - e em seguida os mesmos são eliminados. Essa alternativa se mostra particularmente interessante em situações nas quais o contaminante esteja uniformemente distribuído na amostra e sua presença comprometa a obtenção de um espectro médio representativo, deteriorando assim a correlação com as propriedades de interesse.

Conclusões

Foi possível verificar que a técnica de imagem mostrou-se mais robusta que as formas de medidas convencionais para determinação de propriedades reológicas globais em amostras de borracha, quando na presença de contaminantes.

Agradecimentos

CNPq, IQ/Unicamp, Braslátex, INCTAA (Fapesp 2008-1/57808-1 CNPq 573894/2008-6)