

# Estudos multivariado e univariado de dispersão em sistemas de análise em fluxo (FIA).

**Giovana de F. Lima Martins\*** (PQ)<sup>1</sup>, **Grazielle Cabral de Lima (IC)**<sup>2</sup>, **Pedro Orival Luccas (PQ)**<sup>2</sup>.

<sup>1</sup>Universidade Federal de Lavras (UFLA - MG), Departamento de Química, Campus Universitário, CEP 37200-000, Lavras – MG. <sup>2</sup>Universidade Federal de Alfenas (UNIFAL- MG); Instituto de Química, Campus Sede, CEP 37130-000, Alfenas - MG. \* giovana.martins@dqi.ufla.br

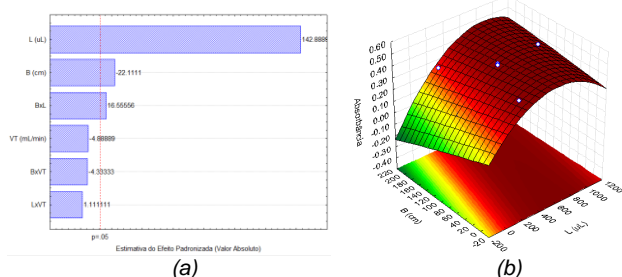
Palavras Chave: Dispersão, otimização, multivariada, univariada, sistema FIA, Doehlert.

## Introdução

Nos sistemas de análise em fluxo (FIA)<sup>1</sup>, às diferentes velocidades de escoamento geram no fluido uma interpenetração nos extremos da zona de amostra, ocasionando uma dispersão da amostra. Visando melhor resultado analítico as condições de dispersão podem ser controladas, e otimizadas. No presente trabalho, objetivou-se avaliar a dispersão em sistemas FIA sob o estudo dos parâmetros experimentais usando técnicas de otimização univariada e multivariada<sup>2</sup>.

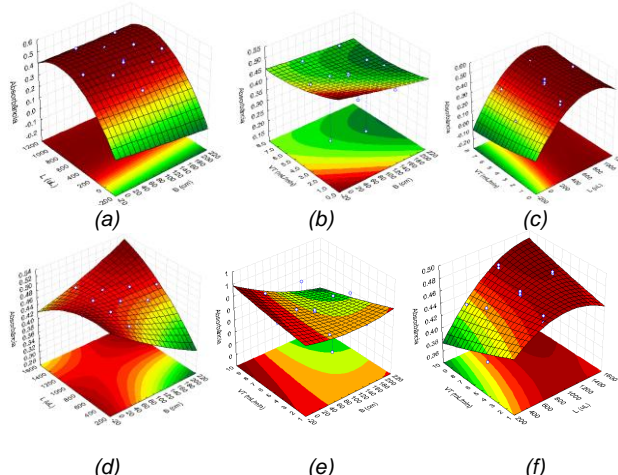
## Resultados e Discussão

Os experimentos foram efetuados com um sistema FIA em linha única, onde alíquotas de  $\text{KMnO}_4$ ,  $2 \times 10^{-4} \text{ mol L}^{-1}$  foram inseridas no transportador (água) e o efeito dos principais fatores [Alça de amostragem – L ( $\mu\text{L}$ ); Bobina reacional – B (cm); Vazão do transportador – VT ( $\text{mL min}^{-1}$ )] que afetam a dispersão foram avaliados a  $\lambda=535 \text{ nm}$ . A Figura 1 apresenta os resultados obtidos a partir da otimização usando planejamento fatorial (Figura 1a) seguido de Matriz de Doehlert (Figura 1b) para os 2 fatores ( L e B) que mostraram-se significativos pela análise do diagrama de pareto apresentado na Figura 1a. Além disso, o diagrama mostrou a ausência de interações BxVT e LxVT, uma interação BxL pouco significativa e a pouca influência de VT. Assim escolheu-se os níveis para a Matriz de Doehlert com base nestes resultados preliminares.

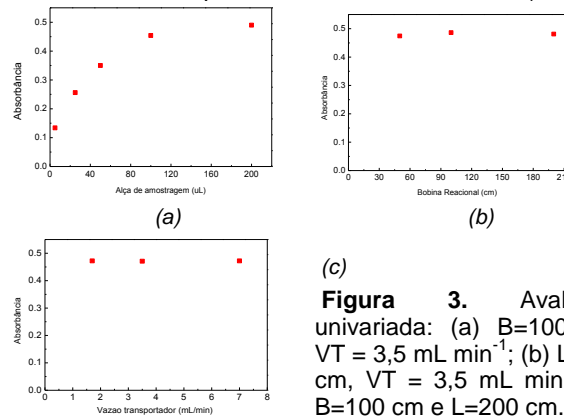


**Figura 1.** (a) Pareto: Resultados do planejamento fatorial  $2^3$  [Níveis B: (-)=50, (+)= 200 cm; Níveis L(-)=50, (+)=1000  $\mu\text{L}$ ; Níveis VT (-)=1,7 e (+)=7,0  $\text{mL min}^{-1}$ ]. (b) Doehlert 2 fatores [Níveis B: 5, 105, 205 cm; L: 25, 270, 515, 760, 1005  $\mu\text{L}$ ].

A Figura 2 apresenta os resultados da otimização utilizando diretamente uma Matriz de Doehlert 3 fatores, e na sequência o deslocamento na superfície de resposta, com base nos resultados da primeira matriz.



**Figura 2.** (a,b,c): Doehlert 3 fatores (Níveis B: 5, 55, 105, 155, 205 cm; L: 25, 195, 365, 535, 705, 875, 1045  $\mu\text{L}$ ; VT: 1, 4, 7  $\text{mL min}^{-1}$ ). (d,e,f) Deslocamento Doehlert 3 fatores [Níveis B: 5, 55, 105, 155, 205 cm; L: 365, 535, 705, 875, 1045, 1215, 1385  $\mu\text{L}$ ; VT: 1,5 , 5,5 , 9,5  $\text{mL min}^{-1}$ ].



**Figura 3.** Avaliação univariada: (a) B=100 cm, VT = 3,5  $\text{mL min}^{-1}$ ; (b) L=200 cm, VT = 3,5  $\text{mL min}^{-1}$ ; (c) B=100 cm e L=200 cm.

## Conclusões

As melhores condições experimentais corroboram em ambos procedimentos. Em termos de sinal analítico, os resultados da otimização multivariada não diferiram significativamente dos obtidos de maneira univariada, e isso pode ser explicado pela ausência de fortes interações entre os fatores. Contudo, os multivariados permitem extrair um maior número de informações a cerca do sistema.

## Agradecimentos

FAPEMIG, CAPES, UFLA e UNIFAL.

<sup>1</sup> Valcarcel, M.; Castro, L. M. D., Ed. *Implenta San Pablo, Cordoba, Espanha*, 1984.

<sup>2</sup> Teófilo, R. F.; Ferreira, M. M. C. *Quím. Nova*, 2006, 29, 338.