

Determinação de nicotina e alcatrão em cigarros por espectroscopia no infravermelho médio e calibração multivariada

Edson I. Muller (PG)¹, Graciele Parisotto (PG)¹, Fabiana E. B. Silva (PG)², Marco F. Ferrão (PQ)³, Érico M. M. Flores (PQ)^{1*}. flores@quimica.ufsm.br

1. Departamento de Química - Universidade Federal de Santa Maria – UFSM – Santa Maria – RS.

2. Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões – URI - Campus Erechim – Erechim – RS.

3. Departamento de Química – Universidade de Santa Cruz do Sul – Santa Cruz do Sul – RS.

Palavras Chave: nicotina, alcatrão, cigarro, calibração multivariada, infravermelho.

Introdução

A produção de cigarros é feita misturando-se diferentes tipos de tabaco que possuem, por sua vez, diferentes quantidades de nicotina e alcatrão. Desta forma, os cigarros são registrados e classificados de acordo com as quantidades desses constituintes. Portanto, o controle de qualidade é necessário que as análises sejam feitas por meio de técnicas robustas e que permitam elevada frequência de determinações. Em geral, os teores de nicotina e alcatrão são medidos na fumaça dos cigarros por meio da Norma ISO 3308/2000), adotada no Brasil pela ABNT¹ e indicada como referência pela Agência Nacional de Vigilância Sanitária através da Resolução 46, de 28 de março de 2001. Entretanto, a determinação destes parâmetros poderia ser feita diretamente nos cigarros, aumentando a frequência de determinações e com menores custos. Baseando-se nos requisitos acima, o objetivo deste trabalho foi desenvolver um procedimento alternativo para quantificar nicotina e alcatrão em cigarros usando espectroscopia por reflectância total atenuada no infravermelho médio com transformada de Fourier (ATR/FT-IR) associada à regressão por mínimos quadrados parciais (PLS).

Resultados e Discussão

Espectros de ATR/FT-IR para 24 amostras de diferentes cigarros foram obtidos usando um espectrômetro PerkinElmer *Spectrum One*, na região do infravermelho médio (4000 cm⁻¹ a 650 cm⁻¹). Foram realizadas 3 replicatas para cada amostra, com resolução de 4 cm⁻¹ e 16 varreduras, utilizando um acessório de ATR. Para o PLS, as informações espectrais foram processadas utilizando o programa *Unscrambler* 6.11. Os modelos foram construídos com os dados centrados na média e também, empregado primeira ou segunda derivada. Como valores de referência para a quantificação de nicotina e alcatrão foram utilizados os valores informados na caixa de cada amostra de cigarro. As regiões onde se evidenciou pouca informação espectral foram excluídas, bem como àquelas onde o ruído no

espectro devido ao vapor d'água e o dióxido de carbono estavam presentes.

O coeficiente de correlação (R), o erro de calibração (RMSEC), o erro de predição (RMSEP) e o número de variáveis latentes (VL)² foram utilizados para validar o modelo (Tabela 1).

Tabela 1. Modelos para nicotina e alcatrão em diferentes amostras de cigarro.

Parâmetros	Nicotina		Alcatrão	
	Modelos		Modelos	
	A*	B**	A*	B**
R	0,995	0,999	0,997	0,997
RMSEC	0,02	0,01	0,19	0,27
RMSEP	0,19	0,16	2,22	2,64
VL	10	07	10	07

* Modelos sem primeira derivada

** Modelos com segunda derivada

O melhor modelo obtido para a determinação de nicotina foi empregando a primeira derivada e para alcatrão o emprego de primeira derivada não melhorou os valores de RMSEP. Desta forma, o modelo apresentou um coeficiente de correlação adequado, com erro de predição baixo, podendo ser utilizado para a calibração e determinação de nicotina e alcatrão em cigarros.

Conclusões

O método analítico proposto para a determinação de nicotina e alcatrão em amostras de cigarro é um método rápido, não produz resíduos nocivos ao meio ambiente. Podendo ser considerado no futuro, uma alternativa para a determinação de nicotina e alcatrão.

Agradecimentos

Os autores agradecem a CAPES e o CNPq.

¹ The Souza Cruz Website. <http://www.souzacruz.com.br/> [09 may 2006].

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)

² Braga, J. W. B.; Poppi R.J. *Quim. Nova* **2004**, 27, 1004-1011.