

Determinação simultânea de sacarose e açúcares redutores em refrigerantes utilizando espectroscopia NIR e calibração multivariada.

Gil N. Almeida¹ (IC), Ana Luísa de Q. B. Ramos^{1*} (PQ), Hiram da C. Araujo Filho² (PQ), Ricardo J. Cassella¹ (PQ). *costabaddini@uol.com.br

1 – Departamento de Química Analítica, Instituto de Química, UFF, Niterói/ RJ – Brasil.

2 – CEFET-Química, Unidade Rio de Janeiro, Rio de Janeiro/RJ – Brasil.

Palavras Chave: refrigerantes, infravermelho próximo, calibração multivariada.

Introdução

A determinação de sacarose e açúcares redutores é uma atividade rotineira na indústria de refrigerantes, que utiliza técnicas relativamente laboriosas. Os métodos convencionais podem ser agrupados em titulométricos, gravimétricos e espectrofotométricos, enquanto que metodologias mais específicas utilizam-se das técnicas de refratometria na escala Brix e, em menor escala, na cromatografia a líquido de alta eficiência (CLAE) com detector de índice de refração¹. Neste trabalho foi utilizada a espectroscopia no infravermelho próximo (NIR), com o objetivo de desenvolver uma metodologia analítica simples, rápida e não destrutiva para a determinação de sacarose e açúcares redutores em refrigerantes com quatro sabores diferentes. O método de regressão por mínimos quadrados parciais (PLS) foi usado para correlacionar a concentração dos açúcares com os dados espectrais, assim como vários pré-tratamentos dos dados foram utilizados para otimizar o modelo de calibração.

Resultados e Discussão

As determinações do teor de sacarose e de açúcares redutores (glicose + frutose) foram realizadas através de CLAE com detecção por índice de refração em amostras de refrigerantes dietéticos com adição de açúcares e de refrigerantes não dietéticos. Foram utilizados refrigerantes nos sabores limão, laranja, guaraná e tipo cola nas concentrações de 0 a 16 % (p/v) para sacarose e de 0 a 12 % (p/v) para açúcares redutores totalizando 188 amostras. Os espectros de absorvância na região do NIR foram adquiridos na faixa de 1100 a 2500 nm, com resolução de 1 nm, utilizando um espectrofotômetro FEMTO NIR 900PLS. Todo o processamento dos espectros foi realizado empregando-se o software The Unscrambler 9.5, assim como a modelagem dos mesmos via PLS. O algoritmo Kennard-Stone, desenvolvido em Matlab 6.0, foi utilizado para a seleção do conjunto de amostras de calibração, sendo empregadas 110 amostras para este fim e 78 amostras para a validação externa. Entre as estratégias de pré-processamento testadas (aplicação de 1^a e 2^a derivadas, alisamento e autoescalamento) apenas 30^ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

o autoescalamento resultou em melhora significativa dos modelos. O espectro completo foi utilizado uma vez que a seleção de regiões do espectro também não resultou em melhora significativa dos modelos. As Figuras 1 e 2 apresentam as correlações entre os dados de calibração, validação cruzada e previsão empregando os melhores modelos obtidos.

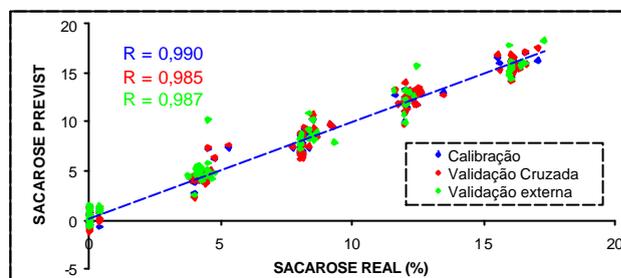
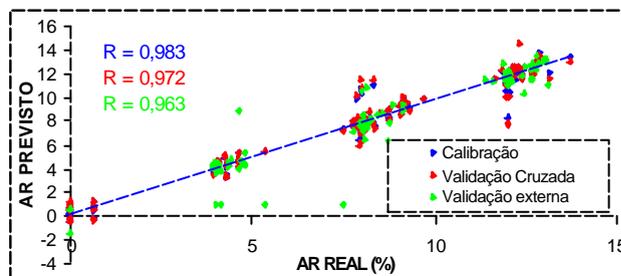


Figura 1: Resultados obtidos para o modelo construído para sacarose (6 variáveis latentes).

Figura 2: Resultados obtidos para o modelo construído



para açúcares redutores (7 variáveis latentes)

O modelo para sacarose apresentou RMSECV de 0,953 %, enquanto que o modelo para açúcares redutores o RMSECV foi de 0,969 %.

Conclusões

Este trabalho mostrou ser possível construir modelos PLS empregando dados a espectroscopia na região do infravermelho próximo para estimar a quantidade de sacarose e açúcares redutores em diferentes sabores de refrigerantes.

Agradecimentos

CNPq

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)

¹Assis, E. M., Asquieri, E. R., *Ciênc. Tecnol. Aliment.* **2003**
23(3),337.