

Análise exploratória e Espectrometria de emissão óptica com plasma indutivamente acoplado (ICP OES) na diferenciação de refrigerantes

Roberta E. S. Froes* ¹(PG), Waldomiro, B. Neto¹(PQ), Rita Lopes P. Naveira²(PQ), Nilton O.C. e Silva²(PQ), Clésia C. Nascientes¹(PQ), José B. B. da Silva¹(PQ)

robertafroes@hotmail.com

1. Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG)-Departamento de Química, 2. Fundação Ezequiel Dias (FUNED) Laboratório de Contaminantes Metálicos, Belo Horizonte -MG

Palavras Chave: icp oes, metais, refrigerantes, análise exploratória.

Introdução

O refrigerante é uma das bebidas mais populares no mundo. Sua composição mineral pode ser investigada empregando a técnica ICP OES de maneira rápida e precisa. Análise de Agrupamentos Hierárquicos e (HCA) e Análise por Componentes Principais (PCA) são ferramentas quimiométricas que tornam possível a visualização de dados multidimensionais em duas ou três dimensões.

O objetivo desse trabalho é quantificação de metais em vários tipos de refrigerante e uma possível separação e classificação dos mesmos.

Resultados e Discussão

Através do dendograma obtido pela HCA apresentado a Figura 1, pode-se observar o agrupamento das amostras em 3 classes distintas.

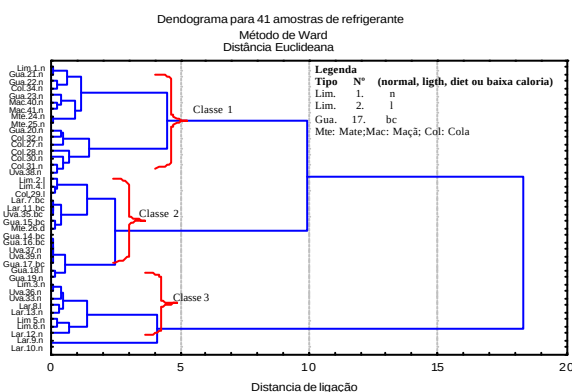


Figura 1. Dendograma correspondente a classificação de 41 amostras de refrigerante.

A classe 2 se distingue das demais por conter as amostras light, diet e de baixa caloria. As classes 1 e 3 se subdividem por tipo de refrigerante: Cola, mate, maçã e guaraná na classe 1 e laranja, limão e uva na classe 3.

Um modelo de 4 PCs foi construído para a PCA que explicam 99,95% da variância dos dados. A análise dos pesos das variáveis nas 3 primeiras componentes indicam que apenas as variáveis Mg, Na, K e Ca são significativas para o experimento.

Observando a distribuição das amostras nos espaços dos PCs, nota-se a presença de 3 classes

30ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

distintas que são as mesmas obtidas por HCA Figura 2. Analisando o peso das variáveis, pode ser observado também que a classe 1 se difere das demais pela concentração de Ca e Mg, a classe 2 pela concentração de Na e a classe 3 pela concentração de K. O fato da concentração de Na ser o fator discriminante da classe 2 que é composta pelas amostras light, diet e de baixa caloria é devido ao emprego de adoçantes a base de sódio o que eleva a concentração do metal nas amostras.

Gráfico dos escores e pesos

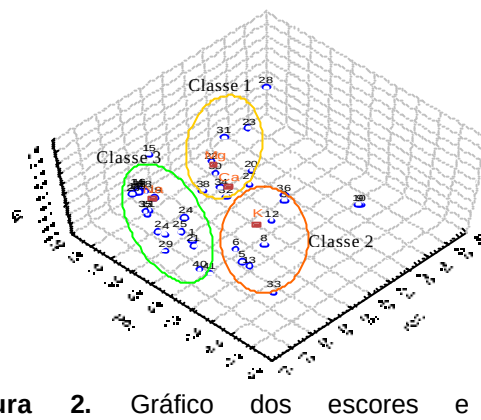


Figura 2. Gráfico dos escores e pesos correspondentes a 41 amostras de refrigerante.

Conclusões

O modelo obtido com o emprego de HCA e PCA possibilitou a classificação de 41 amostras de refrigerantes e especificar quais elementos químicos caracterizam cada classe. A técnica ICP OES associada à análise exploratória se mostraram ferramentas eficazes que podem ser empregadas conjuntamente no controle de qualidade de bebidas refrigerantes.

Agradecimentos

FUNED, CNPQ, CAPES

¹ Ferreira, E. C.; Rodrigues, S.H.B.G.; Ferreira, M.M.C.; Nobrega, J.A.; Nogueira, A.R.A. *Eclet. Quim.* Vol. 27. SP. 2002..

² ANVISA, Portaria nº 685 de 27 de agosto de 1998. www.anvisa.gov.br

