

Classificação das amostras de leite em pó empregando espectroscopia Raman e ferramentas quimiométricas

Kamila de S. Oliveira^{1*} (IC), Mariana R. Almeida¹ (PG), Rodrigo Stephani²(PG), Luiz Fernando C. de Oliveira¹ (PQ). *kamila@ice.ufjf.br

¹Núcleo de Espectroscopia e Estrutura Molecular (NEEM), Departamento de Química, Universidade Federal de Juiz de Fora, CEP 36038-900, Juiz de Fora, MG. ²Gemacom Tech, CEP 36092-050, Juiz de Fora, MG.

Palavras Chave: *leite, Espectroscopia Raman, PLS-DA.*

Introdução

Leite e seus derivados são alimentos consumidos por todas as camadas da sociedade. Devido à grande demanda e às variações de preços que ocorrem com as flutuações sazonais, esses produtos são alvos de adulterações econômicas, praticadas com a adição de ingredientes não permitidos. Neste trabalho uma metodologia para identificação de adulteração em um dos principais produtos de exportação brasileira na área de lácteos, o leite em pó, foi desenvolvida empregando a técnica de espectroscopia Raman e o algoritmo de classificação PLS-DA¹.

Resultados e Discussão

As amostras de leite em pó foram adquiridas no comércio da cidade de Juiz de Fora (MG). O leite em pó foi adulterado em laboratório com soro e/ou amido em concentrações que variaram de 0 a 50% (m/m), através de mistura física. Os espectros Raman foram coletados em espectrômetro RFS 100 FT-Raman Bruker com linha de excitação em 1064 nm. Para tratamento dos dados e utilização das ferramentas quimiométricas utilizou-se o software Matlab 7.5 utilizando normalização e segunda derivada como pré-processamento dos dados.

Os espectros Raman dos leites adulterados apresentam mudanças nos modos vibracionais característicos dos adulterantes; a Tabela 1 mostra as regiões dos espectros Raman que sofrem modificação com adição de soro e/ou amido.

Tabela 1: Modos vibracionais que se intensificam com a adição de soro e amido²

Soro em pó	Amido	Atribuição Tentativa
2980 - 2880		$\nu(\text{C-H})$
	1343	$\nu(\text{C-O}) + \delta(\text{C-O-H})$
1262	1266	$\tau(\text{CH}_2)$
1120 - 1087	1129 - 1050	$\nu(\text{C-O}) + \nu(\text{C-C}) + \delta(\text{C-O-H})$
477	477	$\delta(\text{C-C-C}) + \delta(\text{C-C-O})$

A análise discriminante por mínimos quadrados parciais (PLS-DA) foi realizada com o objetivo de distinguir os espectros Raman das amostras adulteradas e identificar o tipo de adulteração, uma vez que a análise qualitativa dos

espectros permitiu a identificação de amostras adulteradas a partir de 10% m/m do adulterante.

O PLS-DA foi empregado com 5 variáveis latentes; a classe 1 do modelo representa as amostras de leite sem adição de soro e/ou amido; a classe 2 descreve as amostras com soro (1-50% m/m); a classe 3 representa as amostras de leite com amido (1-30% m/m) e as amostras com adição de soro e amido são representadas pela classe 4. A Figura 1 exibe alguns resultados obtidos para a classificação das amostras de leite em pó.

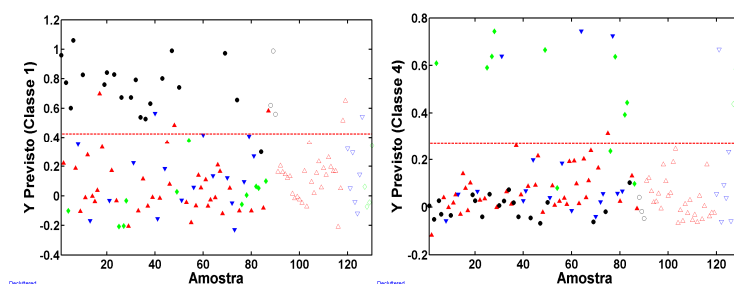


Figura 1. Modelo de classificação obtido para as amostras de leite em pó: sem adulteração (Classe 1- ●) e adulteradas com soro e amido (Classe 4- ◆).

O erro de classificação para as amostras de previsão foi de 3,75% para a classe 1 e 5,17% para a classe 2; todas as amostras de previsão foram classificadas corretamente na classe 3 e para a classe 4 o erro de classificação foi de 1,28%.

Conclusões

As informações fornecidas pelos espectros Raman juntamente com o PLS-DA podem auxiliar na identificação de leites adulterados, permitindo uma análise rápida sem a necessidade de preparo de amostras.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPEMIG, FINEP

¹ Barker, M.; Rayens, W. J. *Chemometrics*, **2003**, 17, 166.

² Yang, L. Zhang, L. M. *Carbohydr Polym.* **2009**, 76, 349.