

## Aplicando calibração multivariada em prática experimental para graduação.

Luana Ferreira da Costa<sup>1</sup> (PG)\*, Silvia Keli de Barros Alcanfor<sup>2</sup> (PQ).

lneuef@gmail.com

Palavras Chave: Quimiometria, Calibração Multivariada, Ensino de Química, Graduação.

### Introdução

A quimiometria teve seu início na primeira metade da década de 70 e sua aplicação era restrita, afinal não havia tecnologia computacional para processar grandes quantidade de cálculos necessários para aplicações práticas<sup>1</sup>.

Com o avanço computacional, por volta de 1985, a quimiometria pôde ser aplicada como disciplina acadêmica oferecendo aos estudantes: base teórica e aplicação prática dos conhecimentos; mais tarde em 2001, foi publicado um livro didático de quimiometria<sup>1</sup>.

Segundo GOMES<sup>2</sup>, já foram propostos vários métodos quimiométricos para utilização didática fazendo uso de equipamentos alternativos. Com a consolidação da quimiometria, sua introdução em cursos de graduação é justificada e adaptações de alguns experimentos se fazem necessários<sup>3</sup>.

Tendo em mente o avanço da quimiometria, a tecnologia computacional disponível atualmente, neste trabalho propõe-se a utilização da calibração multivariada para determinação de concentrações em uma mistura binária e compará-la com a calibração univariada numa prática experimental para cursos de graduação.

### Resultados e Discussão

Inicialmente são necessárias 10 misturas binárias de cafeína (CAF) e ácido acetilsalicílico (AAS) com concentrações variando de 1,25 a 6,25gL<sup>-1</sup>. Para o preparo das soluções padrão, são pesadas 0,2g de ácido acetilsalicílico e dissolvido em 2mL de álcool metílico, o volume de um balão de 200mL é completado com água deionizada. A solução de trabalho é preparada transferindo-se uma alíquota de 10mL da solução padrão de AAS para um balão volumétrico de 200mL, adicionando-se 80mL de NaOH e completando o volume com água deionizada e então o balão é deixado em repouso por 10 minutos. O mesmo procedimento é realizado para a cafeína.

A partir da solução de trabalho de AAS e da CAF são retiradas alíquotas para o preparo das soluções diluídas de acordo com a tabela 1 em balões volumétricos de 50mL e volume completado com água deionizada para obtenção dos espectros no espectrofotômetro UV-Vis.

Tabela 1.

S.d.	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
AAS	10	20	10	20	05	25	15	15	15	15
CAF	10	10	20	20	15	15	05	25	15	15

\*S.d.: Soluções diluídas; Volumes em mL

Tendo as concentrações conhecidas das 10 misturas, essas foram utilizadas para estimar os espectros puros de cada componente (figura 1) para efeito de comparação com os espectros puros. Os espectros estimados foram obtidos através de cálculos de matriz<sup>4</sup>.

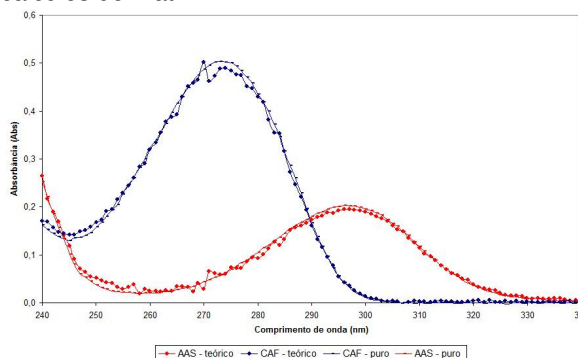


Figura 1. Espectros estimados x Espectros puros.

Preparando 8 novas misturas binárias de concentrações conhecidas, na mesma faixa que a anterior, é possível calcular as concentrações de cada componente através dos espectros puros estimados e compará-los com os valores obtidos utilizando o procedimento para análise de misturas binárias de SKOOG<sup>5</sup>.

### Conclusões

Acredita-se que esta seja uma prática experimental ideal para um primeiro contato de estudantes de graduação com a calibração multivariada. Utilizando os dois métodos é possível comparar resultados e discutir a melhor aplicação de cada método.

<sup>1</sup> NETO, Benício de B. et al. *Quím. Nova*. 2006, v.29, n.6.

<sup>2</sup> GOMES, Marcos S. et al. *Quím. Nova*. 2008, v.31, n.6.

<sup>3</sup> FERREIRA, Márcia M. C. et al. *Quím. Nova*. 1999, v. 22, n.5.

<sup>4</sup> PIMENTEL, Maria Fernanda et al. *Quím. Nova*. 2008, v.31, n.2, pp.462-467.

<sup>5</sup> SKOOG, Douglas A. *Fundamentos de Química Analítica*. São Paulo: Thomson, 2006. pp.754.