

Análise exploratória multivariada de diferentes argilominerais com base nos teores de metais determinados por ICP-OES

André M. de Souza^{1*} (PQ), Ioná Rech¹ (PQ), David V. B. de Campos¹ (PQ), José C. Polidoro¹, Ronei J. Poppi² (PQ). *andre.souza@cnpq.embrapa.br

¹ Embrapa Solos, Rua Jardim Botânico, 1.024 - Jardim Botânico Rio de Janeiro, RJ - CEP 22460

² Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, Caixa Postal 6154, Campinas, SP, CEP 13083-970

Palavras Chave: PCA, fertilizantes, liberação lenta.

Introdução

A Embrapa Solos vem desenvolvendo tecnologias de produção de novos fertilizantes, destacando-se os fertilizantes nitrogenados de liberação controlada de nitrogênio. Os argilominerais do grupo dos aluminossilicatos podem conferir a característica de liberação controlada dos fertilizantes nitrogenados (Blaylock, 2007). Diferentes tipos de argilominerais estão disponíveis no mercado, desta forma, destaca-se a necessidade de um rigoroso controle de matéria prima para evitar equívocos no desenvolvimento de novas formulações. Sendo assim, a Quimiometria - área de Química que envolve a aplicação de métodos matemáticos, estatísticos e computacionais para investigar, interpretar, classificar dados de interesse químico - se apresenta como uma importante ferramenta para esta finalidade. A análise de Componentes Principais (Principal Componente Análises, PCA) é um dos métodos mais importantes utilizados na Quimiometria e é a base para diversos métodos de análise exploratória, classificação e reconhecimento de padrões. Normalmente, a PCA é utilizada com o objetivo de visualizar a estrutura dos dados, encontrar similaridades entre amostras, detectar amostras anômalas e reduzir a dimensionalidade do conjunto de dados.¹ Sendo assim, neste trabalho, as concentrações dos íons cobalto, cobre, cromo, ferro, níquel, manganês e zinco foram determinadas por espectrometria de emissão óptica com plasma indutivamente acoplado (ICP-OES) em cinco diferentes argilominerais utilizados na formulação de fertilizantes de liberação lenta. Os resultados de concentração foram analisados por PCA com o objetivo de avaliar se os argilominerais estudados podem ser discriminados com base nas concentrações dos íons analisados por ICP-OES.

Resultados e Discussão

As amostras (250 mg) foram submetidas à digestão em forno microondas com água régia (temperatura de 140°C por 30 min., rampa 15°C/min, resfriamento 20 min e pressão de 0,5 a 20 bar). Uma matriz 50x7 foi obtida (10 replicatas para cada tipo de argilomineral). Após a análise por PCA (Matlab 7.0), pode ser observado que as 6 primeiras componentes principais (PC) explicam 99,76 % da variância explicada. Na Figura 1, no gráfico dos escores, pode ser observado que a PC1 (55,82 %) é responsável por diferenciar os argilominerais 3, 4 e

5 dos 1 e 2, enquanto a PC2 (29,38 %) por diferenciar os argilominerais 1 e 3 dos demais. Na Figura 2, no gráfico dos pesos, pode ser observado que as variáveis mais importantes para a PC1 são os íons de Co, Cr, Cu e Ni, enquanto para a PC2 as variáveis mais importantes são Zn, Fe e Cu, respectivamente.

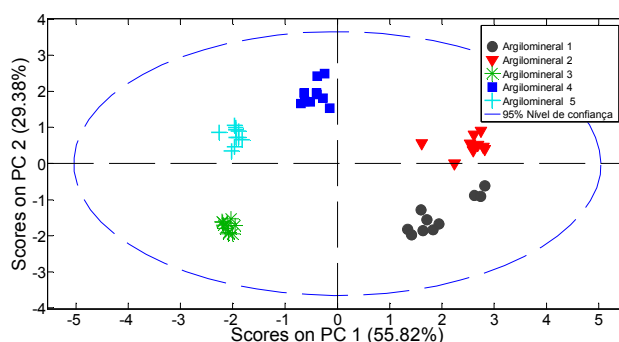


Figura 1. Gráfico de escores da PC1xPC2.

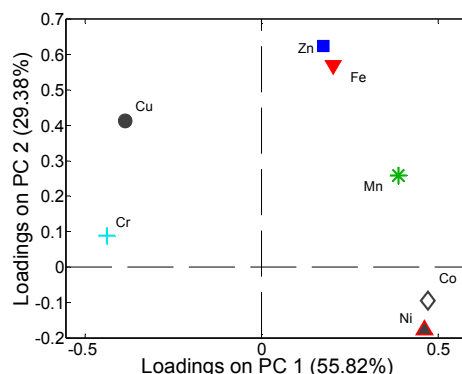


Figura 2. Gráfico de pesos da PC1xPC2.

Conclusões

Com base nos resultados preliminares obtidos através da PCA podemos concluir que existe a possibilidade de, no futuro, construir um modelo de classificação dos argilominerais (baseado em métodos supervisionados de análise multivariada) com base nos teores dos íons analisados por ICP-OES para a finalidade de controle de matéria prima.

Agradecimentos



¹ Blaylock, A. O futuro dos fertilizantes nitrogenados de liberação controlada. Informações Agronômicas, Piracicaba, 120, 2007.

² Brereton, R.; Chemometrics for Pattern Recognition, John Wiley & Sons: Chichester, 2007.