

APLICAÇÕES DE FERRAMENTAS QUIMIOMÉTRICAS À ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL NO INFRAVERMELHO PRÓXIMO PARA ANÁLISE DE AMOSTRAS ALIMENTÍCIAS¹

Laís Aparecida Piaz², José Augusto da Col³

¹Vinculado ao projeto “Aplicação de ferramentas quimiométricas à espectroscopia vibracional no infravermelho próximo para análise de amostras alimentícias”

²Acadêmica do Curso de Licenciatura em Química – CCT – Bolsista PROBIC

³ Orientador, Departamento de Química – CCT – jose.col@udesc.br

Desde os primórdios da civilização humana, é possível observar que os cereais são parte significativa da pirâmide alimentar, devido ao alto teor de carboidratos, que são transformados em glicose quando digeridos e absorvidos pelo organismo. Nos dias atuais, devido ao avanço da medicina, há um maior conhecimento sobre alergias e intolerâncias a alimentos.

A impossibilidade de certas pessoas de digerir a proteína chamada glúten, presente em cereais como trigo, centeio e cevada, causa a doença celíaca e fez com que a demanda por produtos alternativos aumentasse. Farinhas de arroz, milho e coco, entre outras, são excelentes alternativas para um consumo seguro.

Procurando garantir que as fontes alternativas de cereais não sejam adulteradas, evitando assim crises alérgicas em pessoas predispostas, foi proposto um método de determinação do teor de farinha de trigo em farinhas alternativas empregando a espectroscopia de infravermelho próximo (do inglês, *Near Infrared Spectroscopy*, NIR) com a Quimiometria. Esse procedimento tem como vantagem ser um método não-destrutivo, com a análise direta das farinhas e sem a necessidade do uso de reagentes e a geração de resíduos. Os modelos matemáticos e estatísticos construídos com dados espectroscópicos são considerados limpos, estando de acordo com os conceitos da Química Verde.

Para tanto, foram selecionadas cinco amostras de farinha com características físicas semelhantes à farinha de trigo, sendo farinha de arroz integral, aveia, batata doce, coco e grão de bico. Para a análise, foi definida uma massa final de amostra de cerca de 3 g, que foram homogeneizadas em vortex, acondicionadas em cubetas de vidro e analisadas no espetrômetro Shimadzu UV- 3600 PLUS. As condições operacionais do equipamento foram faixa espectral de 780 a 2400 nm, resolução espectral de 1 nm e uma única varredura.

Para a construção dos modelos quimiométricos, os dados foram convertidos de refletância para pseudo-absorbância ($\log 1/R$) e normalizados por padronização normal de sinal (SNV) para minimizar possíveis efeitos de espalhamentos de radiação e tamanho de partículas. Os espectros foram alisados por Savitzky-Golay, com janela de 19 pontos, para a remoção de ruído experimental (**Figura 1**).

Um modelo PCA foi então construído com os espectros NIR das 24 amostras de farinhas centrados na média (1621 variáveis), sendo escolhidas 4 componentes principais, que foram capazes de expressar 98,06% de variância. A análise dos gráficos de *scores* (**Figura 2a**) mostra que a PC1 consegue discriminar as farinhas de batata doce e coco das demais amostras (arroz, aveia, grão de bico e trigo), enquanto a PC2, separa essas duas farinhas (batata doce e coco). O

gráfico de *loadings* (**Figura 2b**) mostra as regiões espetrais responsáveis pela separação das amostras, como aquela próxima a 1750 nm com influência na separação das amostras de coco e a de 2100 a 2300 nm, da separação das farinhas de batata doce.

Assim, conclui-se pela PCA que os espectros NIR contém informações suficientes para discriminar as amostras de farinhas, sendo um resultado promissor e que poderá ser expandido na construção de modelos de calibração do teor de adulterantes em amostras alimentícias, especificamente em farinhas.

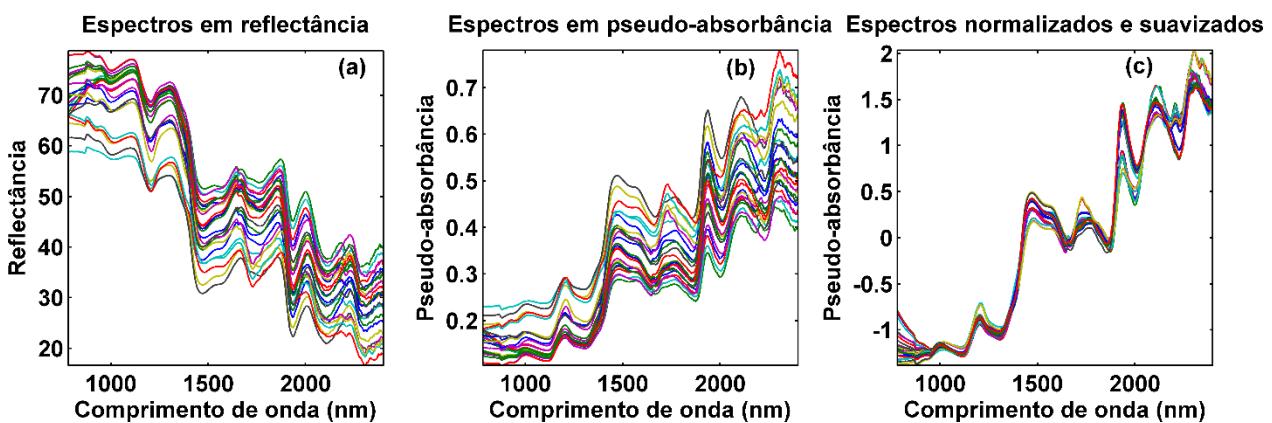


Figura 1. Espectros NIR sobrepostos em reflectância (a), pseudo-absorbância (b) e normalizados e alisados (c) para os dados brutos das amostras de farinha.

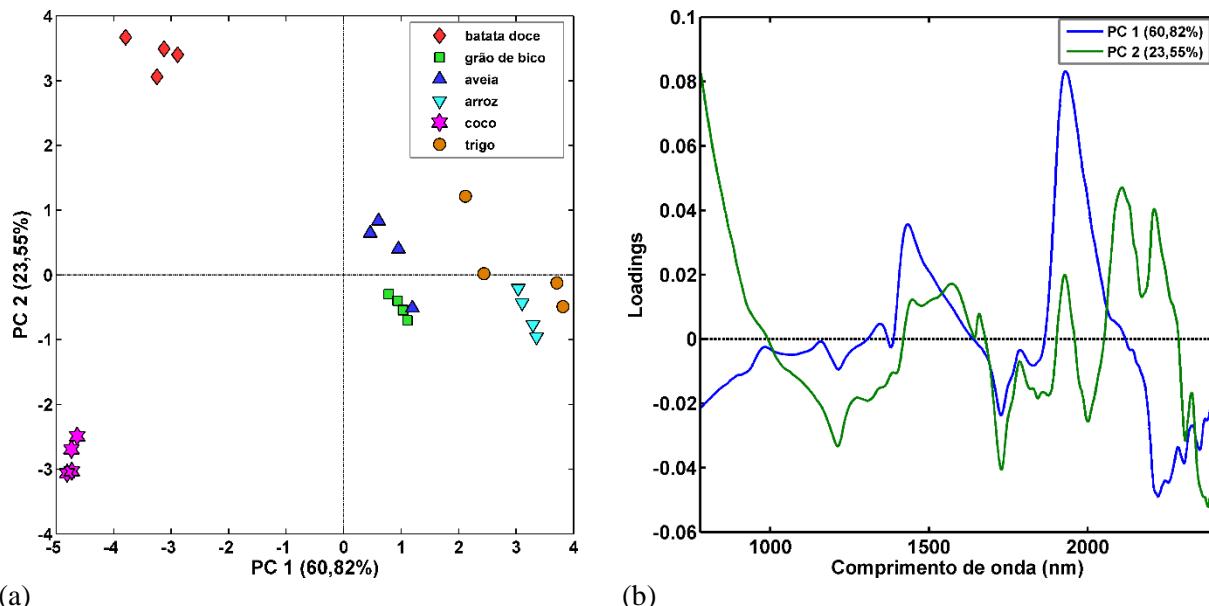


Figura 2. Gráficos de scores (a) e loadings das PC1 (60,82%) x PC2 (23,55%) para todas as amostras de farinha.

Palavras-chave: Quimiometria, NIR, Amostras alimentícias.