

Experimento didático para o ensino do método quimiométrico de análise de componentes independentes

Tiago Ferreira¹ (IC)*, Aline Coqueiro¹ (PQ), Paulo Henrique Março¹ (PQ), Patrícia Valderrama¹ (PQ)

Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR), C.P. 271, CEP 87301-899, Campo Mourão-PR.

Palavras-Chave: espectroscopia, experimentação, quimiometria

Introdução

O setor produtivo industrial vem demandando cada vez mais profissionais com conhecimentos quimiométricos em seus currículos, dessa forma, desenvolver materiais didáticos para ensinar quimiometria é uma maneira de contribuir para a formação desse novo perfil de profissional e colaborar para a formação de novos professores capazes de continuar esse legado.¹ Nesse sentido, um experimento didático foi desenvolvido para o ensino do método quimiométrico de análise de componentes independentes (ICA). Na proposta são empregados os ácidos cítrico e tartárico, presentes em refrigerantes de sabor uva,² utilizando a espectroscopia na região do ultravioleta (UV).

Resultados e Discussão

ICA pode ser definido como um método quimiométrico de deconvolução de sinais que permite separar matematicamente os sinais dos analitos em uma mistura sem a necessidade de realização de separações físicas. Esse método promove a deconvolução de modo que os sinais separados sejam o mais estatisticamente independentes quanto possível.³

Estudos acerca da experimentação sugerem que esse tipo de abordagem é importante no ensino por contribuir para o aprendizado dos conceitos científicos por parte dos alunos.⁴ Dessa forma, espectros na região do UV foram obtidos a partir de soluções com concentrações variáveis de ácidos tartárico e cítrico (Figura 1). O ICA foi implementado através o algoritmo JADE (*Joint Approximate Diagonalization of Eigenmatrices*).³

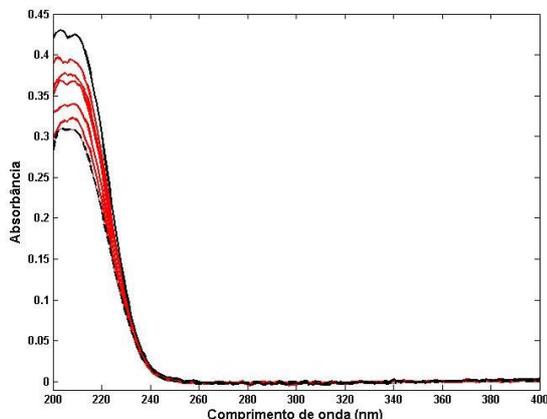


Figura 1. Espectros UV de soluções de ácidos tartárico (—), cítrico (---) e suas misturas (—).

Os Scores do ICA, Figura 2(A), permitem verificar o perfil de concentração “relativa” de cada uma das misturas utilizadas no experimento. Um aumento crescente da concentração de ácido tartárico é observado na Figura dos Scores enquanto a concentração do ácido cítrico é decrescente. Verificou-se a recuperação dos sinais referentes aos ácidos puros, com destaques para os sinais referente ao ácido tartárico na parte positiva, enquanto os sinais referentes ao ácido cítrico encontram-se na parte negativa da Figura 2(B).

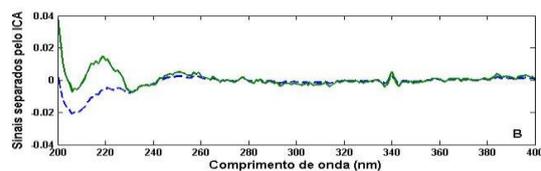
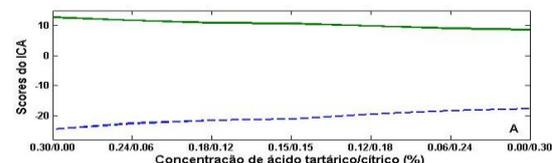


Figura 2. Resultados do ICA. (A) Scores; (B) Sinais. Ácido tartárico (—), cítrico (---).

Conclusões

A necessidade pelo desenvolvimento de material didático para o ensino de quimiometria faz com que o experimento proposto seja uma alternativa. A proposta utiliza de materiais de fácil acesso e o equipamento de espectroscopia na região do UV pode ser considerado, dentre os equipamentos destinados para espectroscopia, de baixo custo relativo estando disponível na maioria das instituições de ensino superior brasileiras.

Agradecimentos

UTFPR & Fundação Araucária

¹VALDERRAMA, L. et al.; Experimento didático para o ensino de MCR-ALS empregando absorção no UV-Vis dos corantes alaranjado de metila e vermelho do congo. In: II ESCOLA DE INVERNO DE QUIMIOMETRIA, Campinas, II, 2015, *Anais* Campinas: [s.i], 2015.

²LIMA, A.C.S.; AFONSO, J.C.; A química dos refrigerantes. *Quím. Nova Esc.*, v. 31, nº. 3, 210-215, ago.,2009.

³RUTLEDGE, D.N.; BOUVERESSE D. J. R.; Independent components analysis with JADE algorithm. *TrAC-Trend. Anal. Chem.*, v. 50, 22-32, out. 2013.

⁴MALDANER, G.; PIEDADE, M.C.T. Repensando a Química: a formação de equipes de professores/pesquisadores como forma eficaz de mudança da sala de aula em química. *Quím. Nova Esc.*, v.1, 15-19, mai.,1995.