

APLICAÇÕES DA QUIMIOMETRIA EM DIFERENTES ÁREAS DA QUÍMICA

Profa Dra Márcia M. C. Ferreira – <márcia@iqm.unicamp.br>
Instituto de Química da UNICAMP
Caixa Postal 6154 - 13084-971,
Campinas, SP
Tel (19) 3788 3023; Fax (19) 3788 3102

A quimiometria tem uma vasta aplicação nas diferentes áreas da química. Na química medicinal, a quimiometria é o grande esteio dos estudos QSAR nos quais se relaciona a estrutura molecular dos compostos com a sua atividade biológica. Na indústria, a quimiometria é usada para acompanhamento de processos e controle de qualidade.

Na área de química ambiental, os métodos de ordem superior também se mostram úteis em estudos de poluição atmosférica para a identificação de fontes. Métodos de análise exploratória e de reconhecimento de padrões são utilizados para discriminar diversos tipos de alimentos, com base nos teores de minerais. Utilizando métodos de regressão é possível quantificar simultaneamente os teores de cafeína, trigonelina, proteína e açúcar em grãos de café usando dados de espectroscopia e também detectar e dosar a adição de caramelo em destilados alcoólicos. Estes são alguns dos exemplos a serem apresentados.