

## Comparação entre Fluorescência de Raios-X por Dispersão de Energia e Infravermelho Próximo aliadas a Quimiometria na Calibração dos Teores de Água e Álcool em amostras de Cachaça

Márcia Patrícia Reis Melo<sup>1</sup> (PG), Márcia Miguel Castro Ferreira<sup>1\*</sup> (PQ), Maria Izabel Maretti Silveira Bueno<sup>1</sup> (PQ), Celina Maria Henrique<sup>2</sup> (PQ). \*e-mail: marcia@iqm.unicamp.br

<sup>1</sup>Instituto de Química – Universidade Estadual de Campinas, Caixa Postal 6154, CEP 13083-970.

<sup>2</sup>APTA Regional Centro Sul, SAA, Piracicaba – SP.

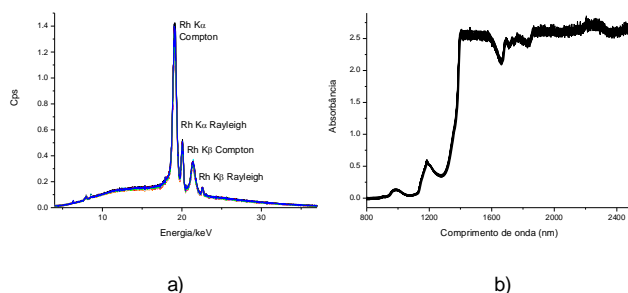
Palavras Chave: Cachaça, Quimiometria, Fluorescência de Raios –X, Infravermelho Próximo.

### Introdução

O crescente consumo de cachaça aponta para a necessidade de métodos rápidos e confiáveis de análise qualitativa e quantitativa<sup>1,2</sup>. Nesse contexto, este trabalho comparou a utilização da Fluorescência de raios-X (XRF) e Infravermelho próximo (NIR) acopladas a ferramentas quimiométricas no monitoramento de teores de água e álcool das cachaças. A aplicação desta metodologia pode levar a um produto final de qualidade, com aceitabilidade no mercado externo.

### Resultados e Discussão

Foram obtidos os valores do teor alcoólico e de água por métodos padrão para 80 amostras de cachaça. As amostras foram então analisadas diretamente, usando-se espectrômetros Shimadzu, modelo EDX 700 e UV-Vis-NIR, modelo Cary 5G na aquisição dos espectros de XRF e NIR, respectivamente, apresentados na Figura 1.



**Figura 1.** Espectros sobrepostos das amostras de cachaça obtidos por: a) Fluorescência de raios-X; b) Infravermelho próximo.

Em seguida, modelos de calibração usando regressão por quadrados mínimos parciais (PLS) foram obtidos no intuito de relacionar os dados obtidos pelos métodos padrão com os espectros de fluorescência de raios-X e infravermelho próximo. Os espectros foram centrados na média e o software usado foi o Pirouette, versão 3.11. Dados estatísticos relativos a estes modelos são mostrados na Tabela 1.

Analisando os valores de RMSEV, RMSEC, Rval e Rcal, pode-se perceber a potencialidade dessas técnicas na calibração dos parâmetros citados.

**Tabela 1.** Parâmetros da cachaça, obtidos com modelos construídos usando PLS.

Parâmetros	VL <sup>1</sup>	RMSEV <sup>2</sup>	Rval <sup>3</sup>	RMSEC <sup>4</sup>	Rcal <sup>5</sup>
Teor alcoólico (% v/v) por XRF	3	1,51	0,94	1,33	0,96
Teor água (% m/v) por XRF	3	2,15	0,84	1,87	0,89
Teor alcoólico (% v/v) por NIR	4	2,61	0,73	2,40	0,80
Teor água (% m/v) por NIR	6	1,49	0,92	1,36	0,94

<sup>1</sup>VL=número de variáveis latentes para a regressão

<sup>2</sup>RMSEV= *Root Mean Square Error of Validation*

<sup>3</sup>Rval = Coeficiente de regressão para o modelo de validação

<sup>4</sup>RMSEC = *Root Mean Square Error of Calibration*

<sup>5</sup>Rcal = Coeficiente de regressão para o modelo de calibração

A utilização de um conjunto de validação externa demonstrou a capacidade de previsão dos modelos de calibração obtidos.

### Conclusões

As técnicas FRX e NIR aliadas a quimiometria mostraram-se metodologias rápidas, sem necessidade de preparo de amostras e ambientalmente corretas (sem uso de reagentes), o que possibilitou a determinação do teor de água e alcoólico da cachaça.

### Agradecimentos

Ao CNPq e APTA.

<sup>1</sup> Parazzi, C.; Arthur, C. M.; Lopes, J. J. C.; Borges, M. T. M. R. *Ciênc.Tecnol. Aliment.* **2008**, 28, 193.

<sup>2</sup> Souza, P. P.; Cardeal, Z. L.; Augusti, R.; Morrison, P.; Marriott, P. J. J. *Chromatogr. A* **2009**, 1216, 2881.