

Comparação entre métodos univariado e multivariado para determinação de carbono no solo por espectroscopia de emissão óptica com plasma induzido por laser

Edilene C. Ferreira¹; Débora Marcondes Bastos Pereira Milori²; Edinaldo J. Ferreira³;
Ladislau Martin-Neto²

¹Bolsista de pós-doutorado, Embrapa Instrumentação Agropecuária, São Carlos – SP, edilene@cnpdia.embrapa.br;

²Pesquisadores, Embrapa Instrumentação Agropecuária, São Carlos, SP;

³Aluno de doutorado, ICMC, Universidade de São Paulo, São Carlos, SP.

Métodos precisos e acurados para a determinação do carbono no solo são essenciais para avaliar os programas de redução do teor de dióxido de carbono antropogênico da atmosfera. Os estudos sobre sequestro de carbono em solos demanda métodos analíticos rápidos e econômicos para determinação de carbono, com técnica capaz de realizar medidas *in situ*. Espectroscopia de emissão óptica com plasma induzido por laser (LIBS) é um tipo de espectroscopia de emissão óptica, que usa pulsos de laser de alta energia para realizar a amostragem e converter o material em micro plasma quente, onde ionização / atomização e os processos de excitação ocorrem em fração de segundos. O espectro de LIBS consiste de linhas de emissão de todos os elementos componentes da amostra. Devido ao simplificado processo de medida, LIBS tem um grande potencial para realizar análises *in situ*. Entretanto, uma medida LIBS, a priori, somente fornece informações qualitativas, pois as análises quantitativas requerem um procedimento de calibração confiável. Assim, o presente estudo teve como objetivo avaliar e comparar dois tipos de calibração para a quantificação de carbono no solo, utilizando LIBS. Os espectros LIBS foram capturados a partir de pastilhas de solo usando um sistema LIBS2500 da Ocean Optics. Solos de regiões tropicais do Brasil, com teor de carbono muito baixo, variando de 0,36 a 0,79%, foram utilizados. Valores de referência para o teor de carbono total nas amostras foram obtidos utilizando metodologia validada para a técnica do Carbono Orgânico Total (TOC). Modelos para calibração univariado e multivariado foram experimentados. Os dois modelos de calibração avaliados apresentaram desempenhos semelhantes para a determinação do carbono no solo. Enquanto o modelo baseado em regressão por mínimos quadrados (univariado) apresentou menor LOD, o Multilayer Perceptron (MLP), método multivariado, apresentou melhor ajuste de calibração e os menores erros de predição. É importante ressaltar, que devido a esta característica da MLP para superar os efeitos da matriz e interferências espectrais, MLPs podem ser treinadas com solos diferentes, constituindo um banco de dados de calibração independente da origem do solo.

Apoio financeiro: FAPESP.

Área: Instrumentação/ Meio Ambiente