

Avaliação de amostras destinadas a programa interlaboratorial por meio da espectroscopia de reflectância no infravermelho próximo (NIR's)

Mariana Dias¹; Victor R. Del Santo²; Gilberto B. de Souza³; Ana Rita A. Nogueira⁴

¹Aluna de graduação em Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP, mariana_mmkr@hotmail.com.br;

²Aluno de graduação Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP;

³Orientador Doutor, Embrapa Pecuária Sudeste, São Carlos, SP;

⁴Pesquisadora, Embrapa Pecuária Sudeste, São Carlos, SP.

A espectroscopia de reflectância no infravermelho próximo (NIRS) se apresenta como uma técnica alternativa aos procedimentos clássicos de análises químicas bromatológicas, sendo precisa, não destrutiva, de baixo custo e com possibilidade de análises simultâneas de vários analitos com aplicação em diversas áreas da ciência, sem a necessidade de utilização de reagentes químicos para a realização de análises. O princípio de análise por NIRS consiste na absorção de luz na região do infravermelho próximo ($4000 - 12800 \text{ cm}^{-1}$ ou 2500 a 780nm) por compostos orgânicos. O método se baseia no fato de que cada um dos principais componentes dos alimentos tem características específicas de absorção, onde ocorrem vibrações das ligações covalentes induzidas pelo calor nos grupos funcionais das moléculas. Para que os espectros obtidos através da espectroscopia NIR possam ser interpretados utilize-se algoritmos de quimiometria, uma área específica destinada à análise de dados químicos de natureza multivariada. O objetivo deste trabalho é a identificação qualitativa por meio de análises de componentes principais (PCA) de diferentes amostras de alimentos para animais que serão destinadas a programa interlaboratorial. Para isso utilizou-se um total de 80 amostras divididas em dois grupos: volumosos e concentrados. Estas amostras são provenientes do Ensaio de Proficiência de Laboratórios de Nutrição Animal (EPLNA) coordenado pela Embrapa Pecuária Sudeste. Os espectros foram obtidos através do espectrômetro NIRFlex N-500 Solids da marca suíça BÜCHI e os dados foram analisados no Software de Quimiometria Pirouette® 4.0 . Na análise de componentes principais observou-se a que houve discriminação entre os tipos de amostra, volumosos e concentrados, e também dentro de cada tipo de material as amostras se agruparam de acordo com as características específicas para cada variedade de forrageiras e de concentrados. Conclui-se que a PCA dos espectros NIR como procedimento qualitativo para a avaliação prévia de amostras utilizadas em programas interlaboratoriais é um método robusto e importante para conhecer se existe discrepância entre as amostras. Esse comportamento é desejável, devido a um dos objetivos do programa interlaboratorial que é o de avaliar a capacidade dos laboratórios na realização das determinações analíticas previstas no EPLNA, considerando-se tipos de amostras distintas.

Apoio financeiro: CNPq/INCTAA, Embrapa Pecuária Sudeste.

Área: Qualidade de Produtos Agropecuários.