APLICAÇÃO DE ESPECTROSCOPIA NA REGIÃO DO INFRAVERMELHO ASSOCIADA À QUIMIOMETRIA PARA A DETECÇÃO DE ADULTERAÇÃO EM AMOSTRAS DE ÁLCOOL GEL 70%.

Fabíola Almeida Bezerra (IC)[1]*, Renata Lino Sergio (IC)[1], Raylla Bueno da Silva Barbosa (IC)[1], Gabriella Rodrigues Fernandes da Silva (IC)[1], Melissa Budke Rodrigues (PQ)[1], Carla Jovania Gomes Colares (PQ)[1].

fabiola.almeida@mail.uft.edu.br, [1]Universidade Federal do Tocantins, Campus de Gurupi.

Palavras Chave: Controle de Qualidade, Desinfecção, Etanol, Adulteração.

Introdução

O álcool antisséptico (gel ou líquido) é um insumo extremamente importante. Contudo, com a escassez deste produto no mercado no cenário de pandemia, foi registrando diversas apreensões de álcool falsificado ou adulterado [1]. Uma técnica que vem sendo largamente utilizada na identificação de adulterações é a espectroscopia na região do infravermelho próximo (NIR, do inglês Near-Infrared Spectroscopy), em que apresenta vantagens como velocidade de análise, integridade da amostra mantida, mínimo preparo de amostra, entre outras [2]. Diante do exposto, justifica-se a execução do presente trabalho como alternativa para realização de medidas aplicadas à análise de adulteração de amostras de álcool 70% em gel, empregando um espectrofotômetro NIR portátil de baixo custo. Os dados espectrais foram analisados usando a análise de componentes principais (PCA, do inglês Principal Component Analysis) para avaliar o comportamento de amostras coletadas no comércio local da cidade de Gurupi, TO, e amostras comerciais de diferentes marcas.

Resultados e Discussão

Foram coletadas 32 amostras de álcool em gel no comércio e também houve a avaliação de 10 diferentes marcas, em que se realizou o estudo das características organolépticas, determinação do pH, densidade e teor alcoólico. A obtenção dos espectros na região do infravermelho próximo foi realizada a partir de um espectrômetro NIR portátil da marca Texas Instruments - Dallas® na faixa espectral no intervalo de 900 a 1700 nm (11099 a 5880 cm^{-1}). O software utilizado foi NIRscanNano GUI versão 1.1.9.As adulterações foram realizadas com a adição de gel de cabelo, babosa e gelatina com álcool 96% líquido comercial na proporção de 50:50 (v v-1) e o teor de álcool foi corrigido para 70% com auxílio de um refratômetro portátil. Foram adquiridos três espectros individualmente (total 9) das adulterações e também houve a aquisição em triplicata dos espectros das 32 amostras coletadas no comércio e das 10 diferentes marcas, totalizando assim 135 espectros para esta etapa. Para a execução da análise de componentes principais, utilizou-se o espectro médio e o software Chemostat. A Figura 1 ilustra o gráfico da PCA, em que, ao observar a Componente Principal 1 (PC1) versus Componente Principal 2 (PC2), é possível visualizar a distribuição das amostras de álcool em gel sem adulteração e adulteradas. Observa-se claramente a formação de dois grupos bem definidos: o primeiro, formado unicamente pelas amostras do álcool coletadas e comerciais, e o segundo formado por amostras adulteradas, em que as duas componentes principais (PC1 e PC2) explicaram 99,9% da variância dos dados.

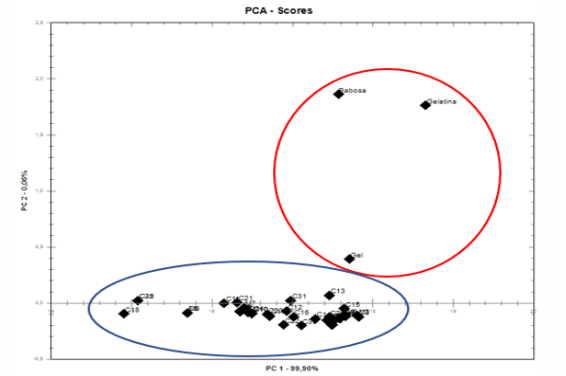


Figura 1. Gráfico de dispersão das amostras em relação a PC1 versus PC2.

Com relação aos demais parâmetros estudados, houve variações do pH, das propriedades organolépticas e da densidade, o que pode ser atribuído aos diferentes tipos de formulações disponíveis para a venda. O teor alcoólico evidenciou que apenas duas amostras coletadas para análise não se enquadram nos padrões exigidos pela ANVISA para a porcentagem estudada (70%).

Conclusões

Observando os resultados obtidos com o equipamento portátil, conclui-se que os espectros no NIR discriminaram com boa eficiência as amostras adulteradas das não adulteradas, com a utilização da ferramenta PCA, demonstrando ser uma técnica aplicável para este fim.

Agradecimentos

À Universidade Federal do Tocantins pela infraestrutura.

[1] BRASIL. Orientações Gerais para Produção de Formulações Antissépticas Alcoólicas. Quarta diretoria, Brasília, 2020.

[2] PASQUINI, C. Near Infrared Spectroscopy: Fundamentals, Practical Aspects and Analytical Application. Journal of Brazilian Chemical Society, v. 14, p. 198-219, 2003.