

DISCRIMINAÇÃO DE AMOSTRAS DE DETERGENTE EM PÓ FALSIFICADAS EMPREGANDO ATR-FTIR E NMF

R.A. Lordeiro^{1*}, J.Coelho Neto^{1,4}, P.L.Lima¹, M.M. Sena², A.C.C. Fulgêncio², I.M. Vieira³

¹Seção Técnica de Física e Química Legal - Polícia Civil de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG

²Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), Belo Horizonte, MG

³Engenharia Química – IPUC – Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais (PUCMG), Belo Horizonte, MG

⁴Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), Belo Horizonte, MG

*Rogério A. Lordeiro; e-mail:lordeirorogerio@gmail.com

Palavras-chave: Infravermelho médio, Sabão em pó, Análise Discriminante

Introdução

Desde 2021 as forças de segurança da região Centro-Oeste de MG vêm apreendendo amostras de sabão em pó (lava roupas) de marca de referência “OMO” falsificadas, sendo apreendidas até o início de maio/2023 cerca de 700 toneladas em operações rodoviárias e em galpões industriais[1]. As análises químicas basearam-se em comparação das características físico-químicas entre as amostras questionadas (PM) e as amostras padrão (PP) através de metodologia que está sendo desenvolvida desde as primeiras apreensões.

Na fatoração de matrizes não-negativas (NMF), a matriz X contém os espectros medidos com intensidades em n números de onda. O tratamento matemático consiste em minimizar a distância entre o produto das matrizes A ($m \times p$) e S ($p \times n$) e a matriz X , com a condição de A e S não possuírem valores negativos:

$$X = AS \quad A, S \geq 0$$

p é o número de componentes e cada linha da matriz S representa um espectro componente com n número de ondas e cada coluna da matriz A os coeficientes (pesos)[2]. O espectro componente pode ser diretamente comparado com espectros das bibliotecas de infravermelho.

Objetivos

Discriminar amostras de detergente em pó falsificadas a partir da análise dos espectros de infravermelho médio utilizando quimiometria.

Métodos

No universo amostral de 7 amostras PP, 7 amostras PM e 7 amostras de produtos adquiridos no mercado local foram coletados em triplicata espectros de absorção no infravermelho médio com transformada de Fourier e acessório de reflexão total atenuada (525 a 4000 cm^{-1}), resolução de $4/\text{cm}^{-1}$

¹, utilizando um espectrômetro Nicolet IS5 com acessório ATR (cristal de diamante). Os dados foram processados utilizando um programa escrito em Python para otimizar os espectros usando NMF.

Resultados e Discussão



Figura 1. Matriz NMF para 4 componentes. A variância total do modelo para 4 CPs foi de 88%. CP1 discrimina as amostras PM (falsificadas) e Coquel das demais. CP4 discrimina as amostras coquel e PM, conforme figura 1.

Conclusão

O modelo proposto mostrou-se efetivo na discriminação das amostras questionadas (PM) das demais amostras.

Referências bibliográficas

[1] <https://g1.globo.com/mg/centro-oeste/noticia/2023/04/23/saiba-como-identificar-sabao-em-po-falsificado-mais-de-700-toneladas-ja-foram-apreendidas-no-centro-oeste-de-mg.ghtml> (acessado em 01-05-23)

[2] Blee AL, et al., Nonnegative assisted principal component analysis: A novel method of data analysis for raman spectroscopy. J Raman Spectrosc.2021;52:1135–1147

Agradecimentos

Ao Edital PROCAD SPCF/CAPES (16/2020), à Rede Mineira de Ciências Forenses/FAPEMIG (RED-00042-16), à Superintendência de Polícia Técnica Científica da Polícia Civil do Estado de Minas Gerais, à FINEP e ao CNPq.

Realização