



E0480

### **APLICAÇÃO DE MODELOS DE TRANSFERÊNCIA DE CALIBRAÇÃO NA QUANTIFICAÇÃO POLIMÓRFICA DE CARBAMAZEPINA POR ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO MÉDIO**

Joana G. de Aguiar (Bolsista SAE/UNICAMP) e Prof. Dr. Ronei J. Poppi (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

A espectroscopia no infravermelho médio aliada à calibração multivariada, precisamente o método de mínimos quadrados parciais (PLS), vem sendo utilizada como técnica eficaz e precisa para quantificações de parâmetros industriais. Se um modelo de calibração é construído especificamente para amostras obtidas num equipamento (situação mestre) e este sofre reparos ou é trocado por um novo (situação escrava), a previsão de novas amostras por esse modelo fica comprometida devido aos erros instrumentais embutidos. Assim, para que não seja necessário realizar uma recalibração, utiliza-se uma técnica conhecida como Transferência de Calibração. Nesse trabalho, os espectros foram inicialmente pré-processados e desenvolvidos modelos de transferência de calibração por padronização direta (DS) e por partes (PDS) para espectrofotômetros de mesma marca e modelo (Bomen MB100), porém com anos de fabricação diferenciados, a fim de quantificar o polimorfo I do princípio ativo carbamazepina. Os erros de previsão (RMSEP) para cada modelo desenvolvido foram obtidos e, para verificar se existia diferença estatística significativa entre eles, utilizou-se o Teste F. O  $F_{\text{crítico}}$  deve ser de 1,91 e os valores obtidos foram: previsão direta (sem recalibração) 7,74, DS 1,24 e PDS 1,07. O resultado para a previsão direta demonstra a necessidade de recalibração ou transferência; a técnica de DS mostrou-se satisfatória, e a PDS foi a que produziu os menores erros. Com isso, conclui-se que ambas podem ser utilizadas como alternativas a recalibração com muita eficiência, poupando tempo e gastos experimentais.

Infravermelho médio - Carbamazepina - Transferência de calibração