

Uso de técnicas de planejamento experimental em Química Analítica

Sérgio Luis Costa Ferreira

Universidade Federal da Bahia, Instituto de Química
Grupo de Pesquisa em Química e Quimiometria, Brasil

A metodologia univariada aplicada na otimização de processos envolvendo fatores experimentais com grande interação entre se, pode estabelecer condições “ótimas” que não correspondem à realidade do sistema analítico em estudo. Desta forma, nos últimos anos, o uso de técnicas multivariadas de planejamento experimental tem se tornado cada vez mais freqüente pela comunidade de Química Analítica. Estas técnicas possibilitam estudos de otimização com as seguintes vantagens: a) as interações entre as variáveis são levadas em conta durante a realização dos experimentos; b) o número de experimentos necessário é menor, contribuindo para uma diminuição no consumo de reagentes e tempo; c) identifica a significância dos fatores nos processos; d) viabiliza a obtenção de modelos que refletem a importância dos fatores nos sistemas estudados. Entre estas técnicas, o planejamento fatorial de dois níveis é um dos mais empregados. Este permite a avaliação preliminar dos fatores nos processos, determinando um modelo linear que é estabelecido entre a resposta de interesse e os fatores que afetam o referido processo. Modelos quadráticos viabilizam condições críticas (máximo ou mínimo) e podem ser obtidos usando as técnicas de superfície de resposta tais como: planejamento composto central, planejamento fatorial de três níveis, planejamento Box-Behnken e a Matriz de Doehlert. Neste contexto, o nosso grupo de pesquisa tem empregado as técnicas de planejamento experimental em processos de digestão de amostra, sistemas de pré-concentração em linha e em batelada, determinação de condições instrumentais em métodos espectroanalíticos, investigando mecanismos de reações envolvendo geração de hidretos de metais e metalóides e etc. Entre os vários trabalhos publicados com este tema, destacamos os artigos de revisão [1-5] abaixo relacionados. Nossa apresentação terá como meta difundir, exaltar e discutir aplicações das técnicas de planejamento experimental em Química Analítica.

[1] S.L.C. Ferreira et al, *Doehlert matrix: a chemometric tool for analytical chemistry - review*, Talanta 63 (2004) 1061 – 1067.

[2] S.L.C. Ferreira et al, *Box-Behnken design: An alternative for the optimization of analytical methods*, Analytica Chimica Acta 597 (2007) 179 – 186.

[3] S.L.C. Ferreira et al, [Statistical designs and response surface techniques for the optimization of chromatographic](#), Journal of chromatography A 1158 (2007) 2 – 14.

[4] S.L.C. Ferreira et al., [Application of multivariate techniques in optimization of spectroanalytical methods](#), Applied spectroscopy reviews 42 (2007) 475 – 491.

[5] S.L.C. Ferreira et al, *Chemometric tools in electroanalytical chemistry: Methods for optimization based on factorial design and response surface methodology* Microchemical journal, 92 (2009) 58 – 67.

[CNPq, CAPES, FAPESB