

## EXPERIMENTO DIDÁTICO DE QUIMIOMETRIA PARA CALIBRAÇÃO MULTIVARIADA NA DETERMINAÇÃO DE PARACETAMOL EM COMPRIMIDOS COMERCIAIS UTILIZANDO ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO PRÓXIMO: UM TUTORIAL, PARTE II

André Marcelo de Souza<sup>#</sup>, Márcia Cristina Breitreitz, Paulo Roberto Filgueiras, Jarbas José Rodrigues Rohwedder e Ronei Jesus Poppi<sup>\*</sup>

Departamento de Química Analítica, Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, CP 6154, 13084-971 Campinas – SP, Brasil

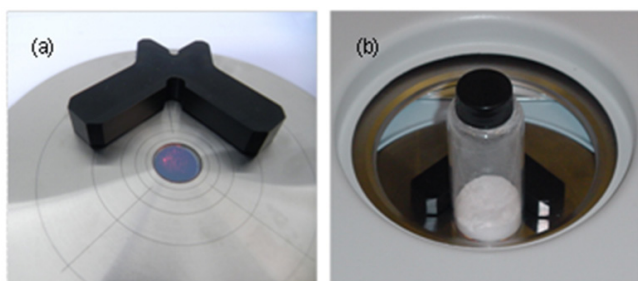


Figura 1S. Acessório de reflectância difusa do espectrofotômetro NIR utilizado no experimento: (a) Foto da janela de saída do feixe de radiação; (b) posicionamento da amostra no feixe de radiação para a aquisição dos espectros

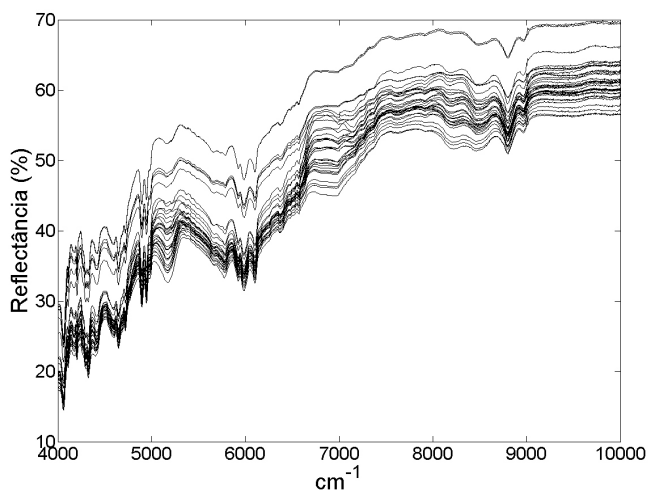


Figura 2S. Conjunto dos espectros das amostras de calibração, validação e dos medicamentos em % de reflectância

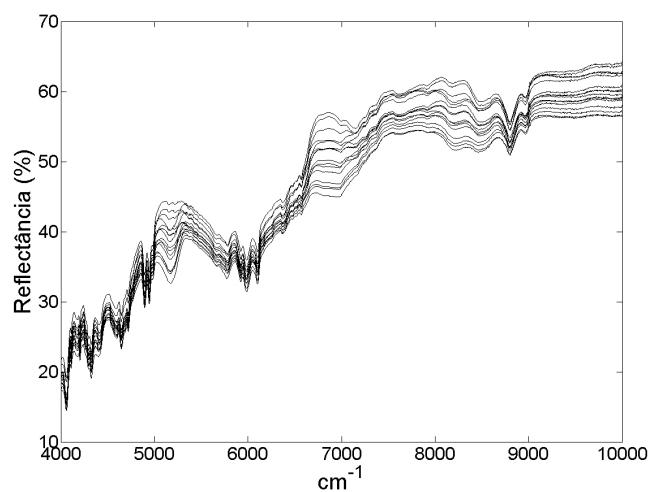


Figura 3S. Conjunto de espectros das amostras de calibração em % de reflectância

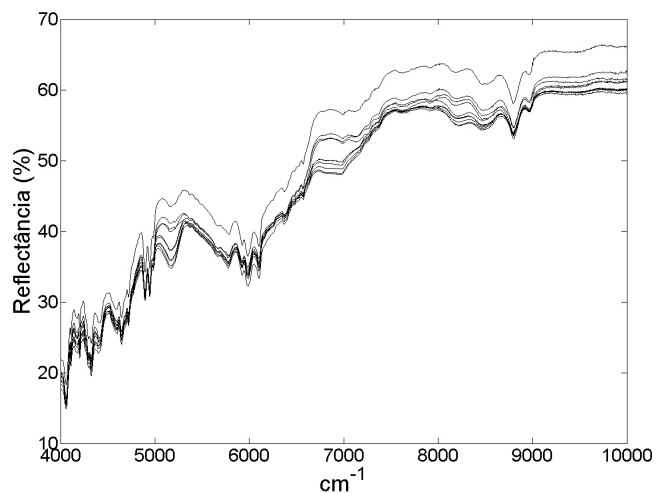


Figura 4S. Conjunto de espectros das amostras de validação em % de reflectância

\*e-mail: ronei@iqm.unicamp.br

<sup>#</sup>Endereço atual: Embrapa Solos, Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária - Rua Jardim Botânico, 1.024 - Jardim Botânico - CEP 22460-000 - Rio de Janeiro- RJ - Brasil.

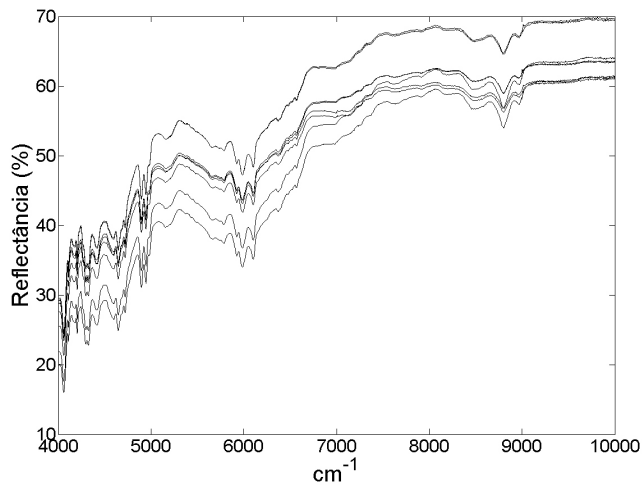


Figura 5S. Conjunto de espectros das amostras de medicamentos em % de reflectância

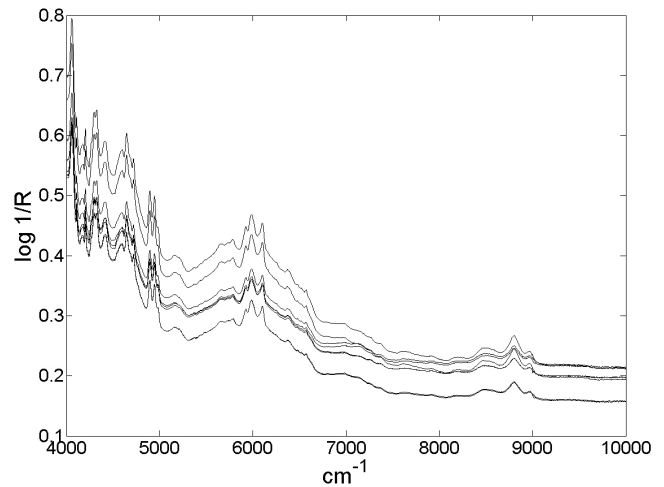


Figura 8S. Conjunto de espectros das amostras de medicamentos em log 1/R

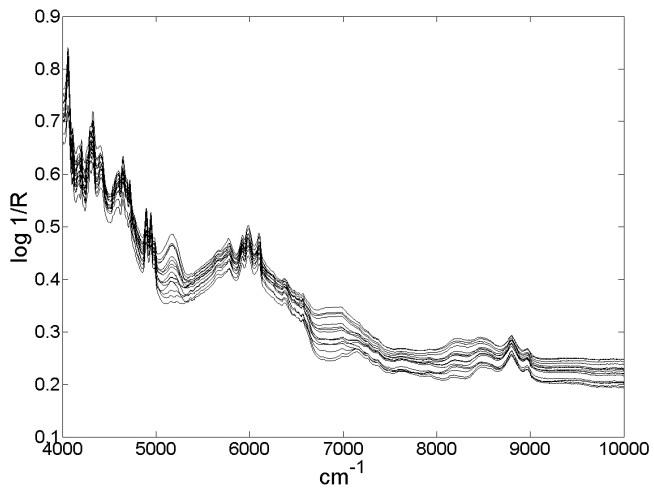


Figura 6S. Conjunto de espectros das amostras de calibração em log 1/R

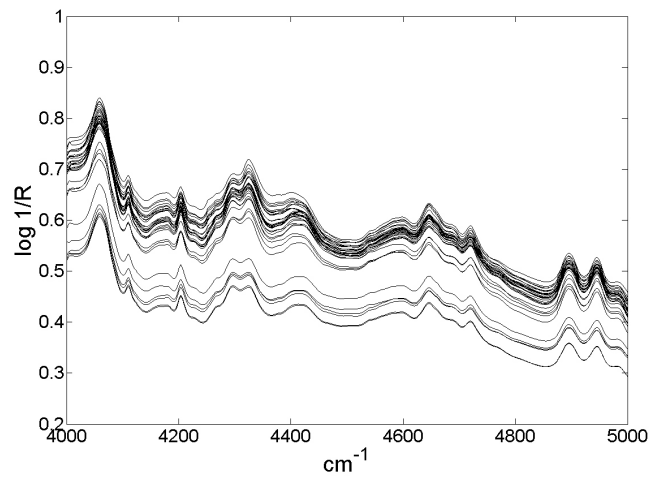


Figura 9S. Conjunto dos espectros após seleção da região espectral de interesse em log 1/R

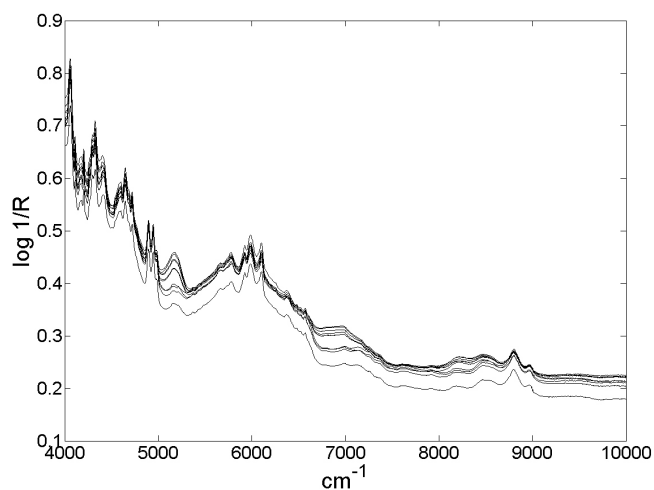


Figura 7S. Conjunto de espectros das amostras de validação em log 1/R

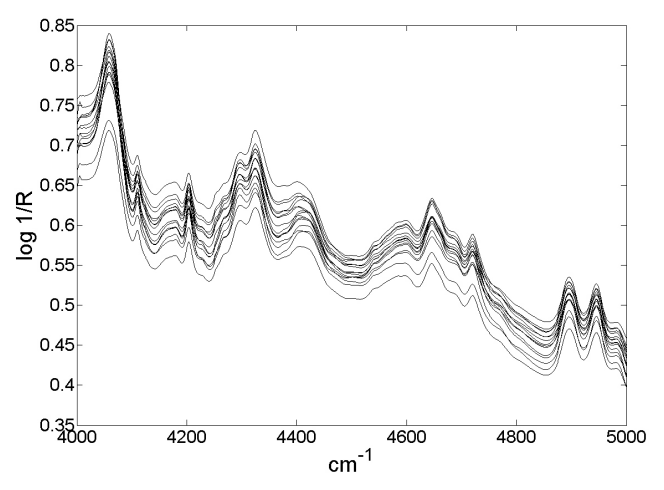


Figura 10S. Conjunto de espectros das amostras de calibração em log 1/R após seleção da região espectral de interesse

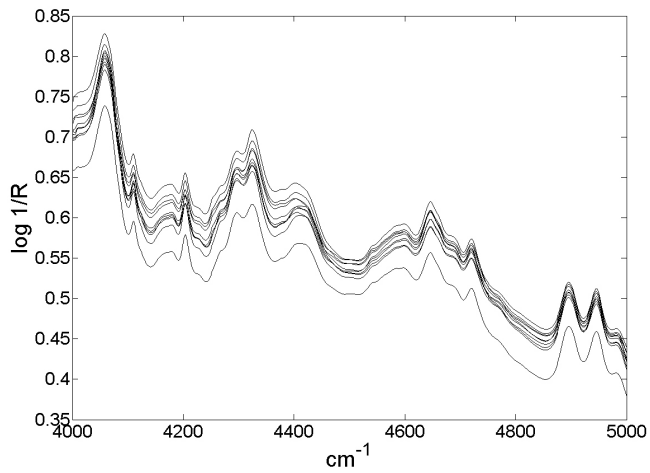


Figura 11S. Conjunto de espectros das amostras de validação em  $\log 1/R$  após seleção da região espectral de interesse

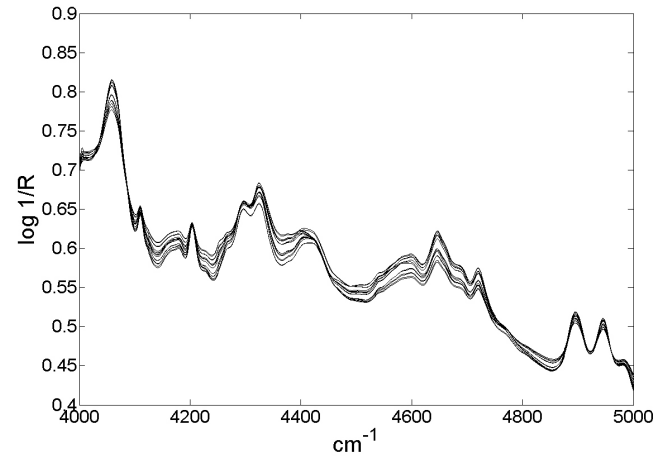


Figura 14S. Conjunto de espectros das amostras de validação após correção por MSC

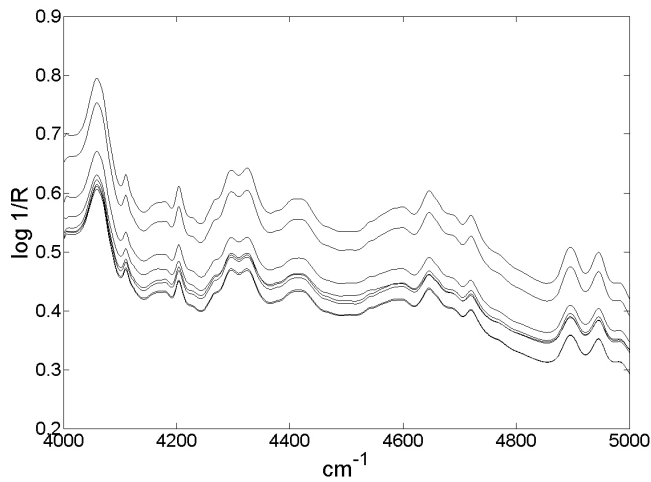


Figura 12S. Conjunto de espectros das amostras de medicamentos em  $\log 1/R$  após seleção da região espectral de interesse

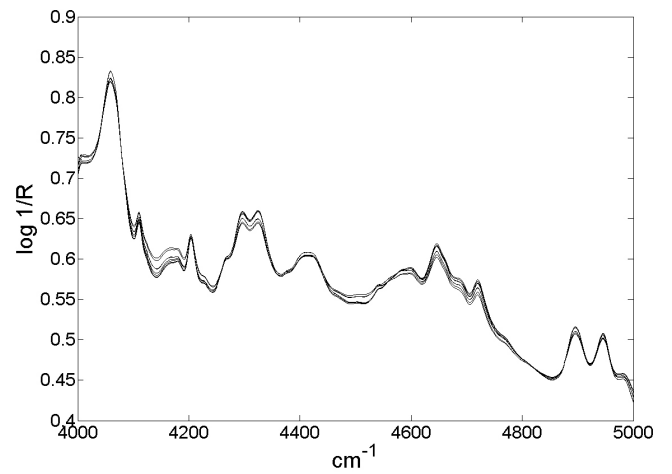


Figura 15S. Conjunto de espectros das amostras dos medicamentos após correção por MSC

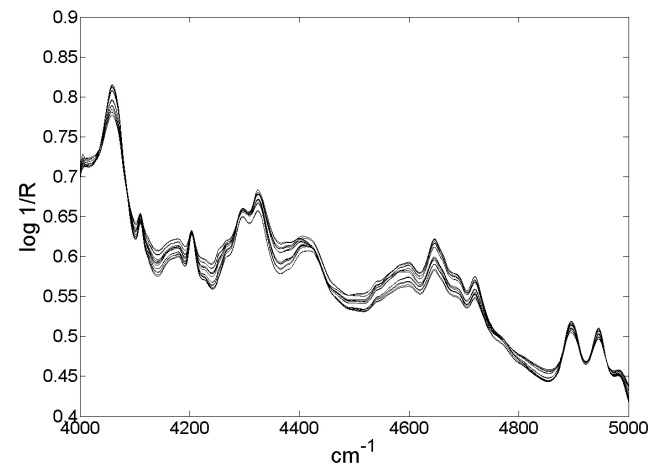


Figura 13S. Conjunto de espectros das amostras de calibração após correção por MSC

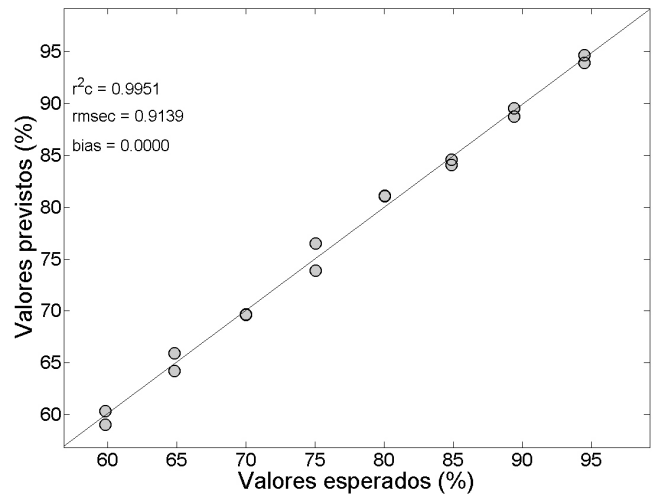
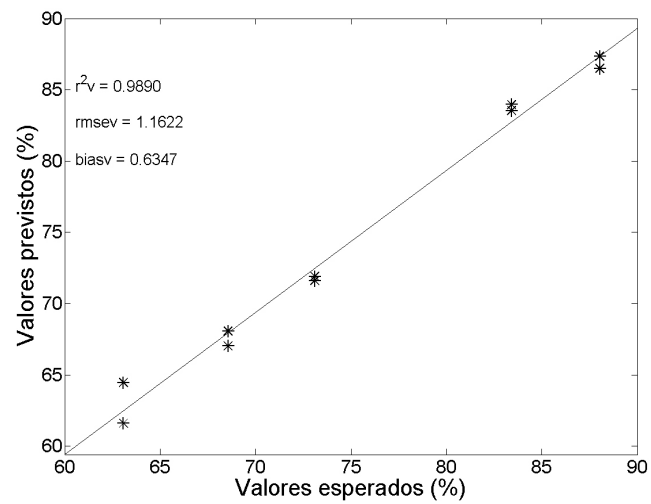


Figura 16S. Gráfico dos valores esperados vs valores previstos obtidos pelo modelo de calibração



**Figura 17S.** Gráfico dos valores esperados vs valores previstos obtidos pelo modelo para validação externa