

# Chromophoreasy, um programa em Excel para reconhecimento e integração de picos de técnicas cromatográficas e de eletromigração.

**Fernando A. S. Vaz (PQ)\*, Marcone A. L. de Oliveira (PQ). \*nando.simas.vaz@gmail.com.**

Grupo de Química Analítica e Quimiometria (GQAQ) - Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Juiz de Fora, 36036-330 Juiz de Fora - MG, Brasil.

Palavras Chave: Detecção/integração de picos, Cromatografia, Eletroforese capilar, Macros de Excel.

## Abstract

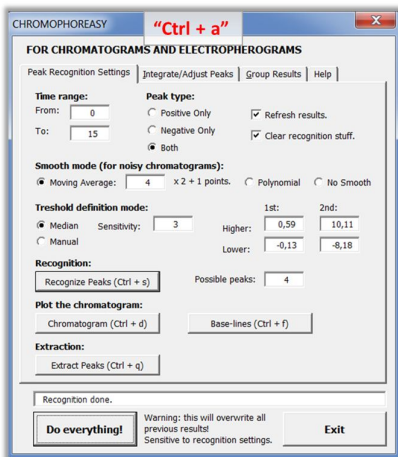
Chromophoreasy, an Excel-base program for recognition and integration of peaks from chromatographic and electromigration techniques. The development, evaluation and application of an alternative program for separation techniques are presented. Smoothing, slope sensitivity, area, height, width, asymmetry factor are some of the features.

## Introdução

Com uma demanda crescente por análises mais rápidas e eficientes, os algoritmos para tratamento de dados cromatográficos e eletroforéticos evoluíram substancialmente.<sup>1</sup> Entretanto, existe uma carência de programas nesta área que sejam simples, práticos, confiáveis e de fácil acesso para estudantes, professores e pesquisadores. Neste sentido, este trabalho mostra o desenvolvimento de um programa de reconhecimento e integração de picos, desenvolvido em Excel. O reconhecimento automático é feito por meio de fatores ajustáveis/selecionáveis, como tipo e intensidade de suavização de ruídos e sensibilidade de detecção. A integração fornece tempo de retenção, área, altura, largura à meia altura, número de pratos, fatores de assimetria, resolução e momentos estatísticos.

## Resultados e Discussão

A Figura 1 mostra a caixa de comandos contendo os ajustes para o reconhecimento dos picos.



**Figura 1.** Caixa de comandos para reconhecimento, ajustes finos e integração de picos.

39ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Criar e Empreender

A partir dos dados (tempo, sinal) de uma corrida foi possível obter todas as informações disponíveis no programa, incluindo o gráfico contendo o sinal e as linhas-base encontradas (Figura 2).



**Figura 2.** Visão geral de um cromatograma, após reconhecimento automático e integração dos picos.

O Chromophoreasy se mostrou preciso e exato no reconhecimento e integração de picos, frente inúmeras condições de sinal-ruído e formato do pico. Posteriormente, foi aplicado com sucesso em cromatogramas simulados e reais, eletroferogramas e electrocromatogramas, com diferentes tipos de detectores, em amostras e padrões.

## Conclusões

A possibilidade de ajustes de parâmetros cruciais para o reconhecimento de picos possibilitou a aplicação de um único programa em diversas técnicas e situações. As respostas obtidas pelo Chromophoreasy foram estatisticamente similares às de softwares comerciais, indicando que, além de prático e de simples manuseio, ele é confiável, mostrando-se uma ferramenta atraente para área de separação.

## Agradecimentos

CAPES: PNPd 23038.007000/2011-70; CNPq: 471288/2013-6 and 302432/2014-0; e FAPEMIG: CEX-PPM 00398-13.

<sup>1</sup> Dyson, N.; *J. Chromatogr. A* 1999, 842, 321.