

## Aplicação de espectrômetro compacto de infravermelho médio (MIR) e quimiometria para classificação de amostras de etanol combustível

Renata S. Amais<sup>1</sup> (PG), Poliana M. Santos<sup>1</sup> (PQ), Luciana F. M. Pataro<sup>2\*</sup> (PQ), Edenir R. Pereira-Filho (PQ) \*luciana.pataro@agilent.com

<sup>1</sup> Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos –SP.

<sup>2</sup> Agilent Technologies, Barueri – SP/

Palavras Chave: etanol combustível, infravermelho, adulteração, água.

### Introdução

O etanol é uma fonte alternativa e renovável de energia. Depois dos Estados Unidos, o Brasil é o segundo maior produtor de etanol. A matéria prima utilizada pelo Brasil é a cana de açúcar.<sup>1</sup> O etanol hidratado tem sido usado como combustível em automóveis desde 1970 e, no Brasil, a quantidade máxima permitida de água nesse produto é de 4,9 % v/v.<sup>2</sup> No entanto, a ocorrência de adulteração de etanol tem sido relatada pela Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP) causando preocupações entre os consumidores e agências governamentais. O processo mais conhecido de adulteração do etanol é caracterizado pela adição de água, a fim de aumentar o volume do produto final.<sup>3</sup> Assim, o objetivo desse estudo foi desenvolver um método rápido, barato e preciso para verificar a autenticidade do etanol baseado nos limites de água permitida pela ANP. O método desenvolvido baseia-se no uso de um espectrômetro compacto de infravermelho operando na região do médio (MIR) combinado com análise quimiométrica dos dados.

### Resultados e Discussão

Neste estudo foram utilizadas 22 misturas de etanol P.A. e a concentração de água variou de 0 a 10 v.v. Além disso, foram utilizadas 10 amostras de etanol proveniente de postos combustíveis. As amostras comerciais foram previamente analisadas usando o método de referência Karl Fisher. As análises por infravermelho foram realizadas em um espectrômetro de MIR compacto modelo Cary 630 (Agilent Technologies Inc., Danbury, EUA). Os espectros de absorção foram coletados na região espectral de 4000-650  $\text{cm}^{-1}$  com uma resolução de 4  $\text{cm}^{-1}$ , utilizando o acessório ATR (*attenuated total reflectance*), sem nenhuma etapa de pré-tratamento da amostra. Antes das análises os espectros (Figura 1) foram normalizados e a segunda derivada foi aplicada. Modelos de classificação foram obtidos utilizando a ferramenta quimiométrica SIMCA (*Soft Independent Modeling of Class Analogy*). Antes de realização dos cálculos, as amostras foram divididas, aleatoriamente, em conjunto de classificação e validação. A partir dos resultados obtidos (Figura 2),

37<sup>a</sup> Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

é possível observar uma nítida separação entre amostras que não atendem a legislação (vermelho) e as que atendem (marrom). Além disso, as amostras comerciais (verdes) se agrupam com amostras que atendem a legislação.

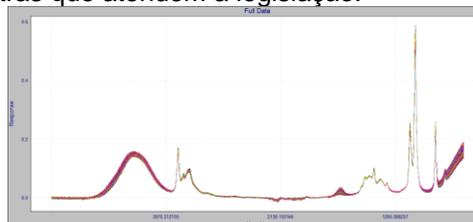


Figura 1. Espectros de MIR.

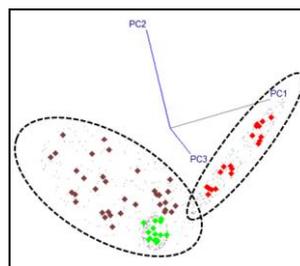


Figura 2. Gráfico de projeções das classes através de análise SIMCA.

O desempenho do modelo desenvolvido foi verificado através do conjunto de validação, que apresentou uma porcentagem de acerto de 82 %. As amostras que não foram corretamente classificadas apresentam concentrações de água no limite permitido pela legislação.

### Conclusões

O método desenvolvido permitiu classificar as amostras de etanol de acordo com a legislação brasileira de forma simples, rápida e barata.

### Agradecimentos

Os autores agradecem o suporte técnico proporcionado pela Agilent Technologies e os recursos do processo 2010/17387-7, Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP).

<sup>1</sup> Renewables 2013, Global Status Report, [www.ren21.net/](http://www.ren21.net/)

<sup>2</sup> Resolução 7, D.O.U. 15.4.2013. [www.anp.gov.br](http://www.anp.gov.br)

<sup>3</sup> Silva, A. C.; Pontes, L. F. B. L.; Pimentel, M. F. e Pontes, M. J. C. *Talanta* **2012**, *93*, 129.