

Determinação de parâmetros físico-químicos das gasolinas C brasileiras por RMN ^1H e regressão linear múltipla (RLM)

Fabrizio de Oliveira Ferreira¹(PG)*, Danilo Luiz Flumignan¹ (PG), Aristeu Gomes Tininis¹ (PG), Márcia Nasser Lopes¹ (PQ), José Eduardo de Oliveira¹(PQ)

¹CEMPEQC - Centro de Monitoramento e Pesquisa da Qualidade de Combustíveis, Petróleo e Derivados; Instituto de Química - UNESP; Rua Francisco Degni, s/n, Araraquara-SP, 14801-970; *olifer@posgrad.iq.unesp.br

Palavras Chave: Gasolina C, RMN ^1H e Regressão Linear Múltipla (RLM).

Introdução

A gasolina é uma mistura de hidrocarbonetos parafínicos, olefínicos, naftênicos e aromáticos, sendo estes variando de 4 a 12 átomos de carbono. A composição da gasolina depende principalmente de dois fatores: do tipo de petróleo e do processo de refino utilizado.

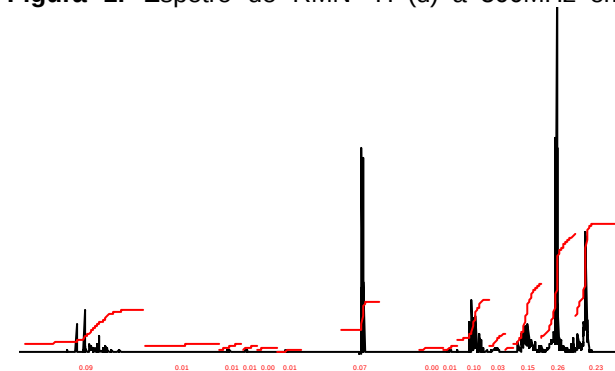
As especificações para a comercialização de gasolinas automotivas e o controle de qualidade são estabelecidas pela Agência Nacional do Petróleo – ANP¹ reguladora do setor que classifica a gasolina automotiva em dois tipos: Gasolina A – isenta de compostos oxigenados e Gasolina C – constituída de gasolina A e 25±1% de AEAC².

O objetivo do presente trabalho foi estabelecer correlações utilizando regressão linear múltipla (RLM) entre os dados de RMN ^1H e os parâmetros físico-químicos: octanagem (MON e IAD) e composição (parafinas, olefinas, naftênicos, aromáticos, etanol e benzeno), utilizando-se amostras de gasolinas comerciais obtidas de diferentes regiões do país.

Resultados e Discussão

Foram analisadas 107 amostras de gasolinas C classificadas inicialmente como conforme, não conforme e adulteradas. Os parâmetros de composição (parafinas, olefinas, naftênicos, aromáticos, benzeno e etanol) das amostras foram determinados por CG-DIC⁴, enquanto os valores de octanagem (MON e IAD) pelos métodos padrão de análise ASTM D2700-99 e ASTM D2699-99.

Figura 1. Espetro de RMN ^1H (d) a 500MHz em



CDCl₃ de uma gasolina C conforme.

O espectro de RMN ^1H foi dividido em 15 regiões (**Figura 1**), a partir de dados obtidos quando utilizadas as misturas de padrões de *n*-parafinas, isoparafinas, olefinas, naftênicos, aromáticos e etanol. Regiões estas atribuídas aos grupos estruturais (CH₃, CH₂, CH e OH) presentes também nos compostos da gasolina.

Utilizando RLM (*software Statistica 5.1*) pode ser observado que os valores das correlações obtidas bem como os erros padrões estimados entre os métodos utilizados se apresentam acima de 0,9500 e abaixo de 1,20, respectivamente (**Tabela 1**).

Tabela 1. Correlação entre os Métodos, com a exclusão dos possíveis “outliers”.

Parâmetro	R	SEE*
Parafinas	0,9707	1,19
Olefinas	0,9860	0,75
Naftênicos	0,9596	0,93
Aromáticos	0,9953	0,66
Benzeno	0,9843	0,02
Etanol	0,9789	0,41
MON	0,9645	0,38
IAD	0,9641	0,49

*SEE: Erro Padrão Estimado

Conclusões

A técnica espectroscópica de RMN ^1H aliado à ferramenta de RLM se mostrou adequada para a análise de misturas complexas como as gasolinas brasileiras contendo AEAC e aplicável a amostras de diferentes regiões o que nos proporciona uma grande representatividade das gasolinas do tipo C comercializadas no Brasil.

A grande vantagem deste método está na simplicidade e rapidez da análise, por não requerer pré-tratamento, além de volume reduzido de amostra e da determinação dos parâmetros ser realizada em apenas um experimento de RMN ^1H .

Agradecimentos



¹ BRASIL. Agência Nacional do Petróleo. Portaria nº 309, de 27/12/2001.

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)

² BRASIL. Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento. Portaria nº 226, de 21/06/2002.

³ Kapur, G.S.; Ecker, A.; Meusinger, R. *Energy & Fuels*. **2001**, 15, 943.

⁴ Flumignan, D. L.; et.al.. *28º SBQ Livro de Resumo*. **2005**, QA067.