

Utilização da espectroscopia de ressonância magnética nuclear de ^1H e quimiometria na avaliação da qualidade de gasolina automotiva

Marcos R. Monteiro¹ (PQ), Luciano M. Lião² (PQ), Leila A. Tavares³ (PG), Elisangela F. Boffo³ (PG), Antonio G. Ferreira³ (PQ), Márcia M. C. Ferreira⁴ (PQ). E-mail: monteiro@ccdm.ufscar.br

(1) Laboratório de Combustíveis/CCDM, DEMa-UFSCar, São Carlos, SP; (2) IQ-UFG, Goiânia, GO; (3) Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear, DQ-UFSCar, São Carlos, SP, (4) IQ- UNICAMP, Campinas, SP.

Palavras Chave: RMN, análise multivariada, gasolina automotiva, qualidade de combustível

Introdução

Os combustíveis são produzidos de maneira a atender requisitos definidos de qualidade. Tais requisitos visam garantir que o produto apresente condições de atender todas as exigências dos motores, bem como da emissão de gases liberados na sua combustão. Nesse contexto, é de suma importância o desenvolvimento de metodologias analíticas para avaliação da qualidade da gasolina automotiva brasileira.

A técnica de RMN tem sido descrita na literatura como ferramenta analítica importante na análise de gasolina, como, por exemplo, na determinação do número de octano, parafinas, olefinas, entre outros^{1,2}. A associação desta técnica com a quimiometria vem demonstrando, por meio de reconhecimento de padrões de RMN de ^1H , a possibilidade de avaliação da qualidade de gasolina automotiva.

Resultados e Discussão

Neste estudo foram utilizadas 50 amostras de gasolina automotiva (aditivada e comum) adquiridas em diversos pontos de revenda do Estado de São Paulo. Estas amostras foram submetidas às análises de aspecto e cor, massa específica a 20°C, destilação, teor de AEAC e benzeno, composição, MON, RON e IAD (por infravermelho). Em função dos resultados obtidos, estas foram classificadas como “conforme” e “não conforme”, de acordo com valores especificados pela Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis – ANP para a gasolina brasileira.

Os dados de RMN de ^1H foram submetidos à Análise por Componentes Principais (PCA) e de Agrupamentos Hierárquicos (HCA), que discriminaram as amostras em dois grupos, como mostram as Figuras 1 e 2. No PCA observou-se um grupo, com valores de escores negativos em PC1, contendo as amostras de gasolinas “conformes”, e outro, com valores positivos, contendo as “não conformes”. A mesma discriminação foi observada no HCA, com índice de similaridade de 0,296. Estes resultados estão de acordo com a classificação feita através das análises físico-químicas realizadas.

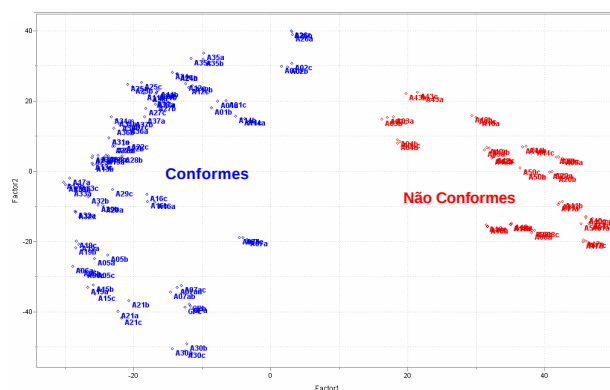


Figura 1. Análise por PCA: PC1xPC2 com 42,4% de variância.

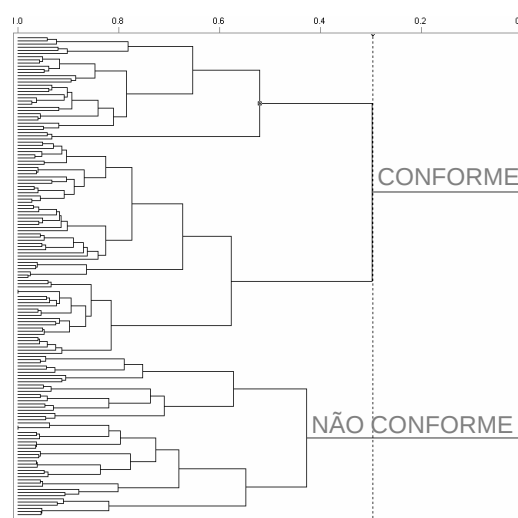


Figura 2. Análise por HCA.

Conclusões

Os resultados obtidos indicam que a análise quimiométrica dos dados de RMN de ^1H pode ser uma das ferramentas de avaliação da qualidade para o conjunto de amostras avaliadas neste estudo. Estudos complementares estão em andamento.

Agradecimentos

CCDM, CAPES, CNPq, FINEP e FAPESP.

¹ Meusinger, R.; e Moros, R. *Fuel* **2001**, 80, 613.

² Kapur, G. S.; Singh, A. P.; e Sarpal, A. S. *Fuel* **2000**, 79, 1023.