

Potencialidade do Modelo HATR/PLS na Região do Infravermelho Médio no Monitoramento e Quantificação de Biodiesel

Maria G. L. da Silva (IC), Joina A. da S. de Souza (IC), Flávia C. G. de Mattos (IC), Ana B. do A. Cotrim (IC), Libna A. P. Santos (IC), Grace F. Ghesti (PG)*, Julio L. de Macedo (PQ)*, José A. Dias (PQ), Sílvia C. L. Dias (PQ)*

Laboratório de Catálise, Instituto de Química, Universidade de Brasília, Brasília-DF, e-mail: grace@unb.br, ilmacedo@gmail.com e scdias@unb.br.

Palavras Chave: Biodiesel, transesterificação, esterificação, etanol, PLS, HATR.

Introdução

Ésteres de ácidos graxos derivados de fontes renováveis (e.g., óleos vegetais, gordura animal) têm se tornado cada vez mais atraente pelo seu grande potencial como combustível alternativo (biodiesel). Os principais métodos de produção de biodiesel são a transesterificação de óleos vegetais e a esterificação de ácidos graxos livres.¹ Neste trabalho, será reportado um novo método, utilizando reflectância total atenuada horizontal (HATR) para a medida da conversão de óleo de soja e ácido oléico em biodiesel.

Resultados e Discussão

Os padrões de biodiesel foram obtidos por transesterificação de óleo de soja (Bio-1) e esterificação do ácido oléico (Bio-2) com etanol catalisada por NaOH e H₂SO₄, respectivamente. A pureza dos produtos foi comprovada por RMN e CG/MS. Os espectros de HATR foram obtidos em um espectrômetro Equinox 55 (Brüker) usando um acessório da PIKE com superfície de ZnSe e ângulo de incidência de 45° (4 cm⁻¹ de resolução e 128 varreduras). Um total de 6 amostras foram preparadas pesando-se diversas misturas de óleo de soja:Bio-1 e de ácido oléico:Bio-2, variando de 0 até 100% de biodiesel (m/m). As misturas foram agitadas por 3 min antes de o espectro ser coletado. Para as análises multivariadas utilizou-se o método PLS-1 com validação cruzada.

Os espectros de HATR antes e após transesterificação apresentaram pequenas diferenças em toda região espectral. No entanto, a região estrutural (662 a 1408 cm⁻¹) apresentou as maiores diferenças, resultando em um modelo HATR/PLS com curva analítica de R² = 0,9999. A Tabela 1 mostra os valores previstos pelo modelo.

Para a reação de esterificação, o modelo HATR/PLS apresentou um valor de R² igual a 0,9999 para a curva analítica (Figura 1) utilizando toda região espectral (4000 a 400 cm⁻¹). Ótimos resultados também foram obtidos para este modelo ao restringir a região espectral para a banda do grupo C=O, onde uma correlação de 0,9991 foi encontrada.

Tabela 1. Valores previstos pelo modelo HATR/PLS para misturas de óleo de soja e Bio-1.

Valores reais (m/m %)	Valores preditos (m/m %)
20,10	20,08
40,65	40,74
59,11	58,90
79,72	77,60

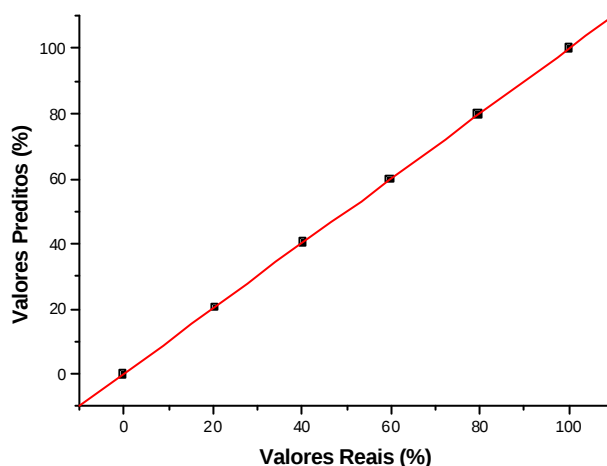


Figura 1. Curva analítica do modelo HATR/PLS para misturas de ácido oléico e Bio-2 (R² = 0,9999).

Conclusões

Desenvolveu-se um novo método de análise, baseado em espectroscopia e quimiometria, para medidas de conversão da reação de transesterificação de óleos vegetais e esterificação de ácidos graxos com etanol. Estabeleceu-se uma boa correlação entre os valores reais e os previstos.

Agradecimentos

MCT/CNPq, UnB-IQ, FINATEC, FINEP-CTPetro e FINEP-CTInfra.

¹ Haas, M. J.; Scott, K. M.; Alleman, T. L.; McCormick, R. L. *Energy Fuels* **2001**, 15, 1207.