

Planejamento fatorial auxiliado por simulação para otimização da separação de ácidos orgânicos por eletroforese capilar.

Fernando A. S. Vaz¹ (PG), Michelle D. de Almeida¹ (IC), Maiby C. Mesquita¹ (IC), Roy E. Bruns² (PQ), Marccone A. L. de Oliveira^{*1,2} (PQ).* marcone.oliveira@ufjf.edu.br.

¹Grupo de Química Analítica e Quimiometria (GQAQ), Universidade Federal de Juiz de Fora (UFJF), Departamento de Química, Juiz de Fora, MG. ² Departamento de Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP.

Palavras Chave: Eletroforese Capilar, Ácidos Orgânicos, Planejamento fatorial, Simulação.

Introdução

Ácidos orgânicos (AO) são espécies importantes presentes em inúmeras matrizes de caráter biológico e alimentício. Tais compostos podem ser prontamente separados por eletroforese capilar de zona (CZE), sob fluxo invertido e detecção indireta. O objetivo deste trabalho foi otimizar através de planejamento fatorial com o auxílio de simulação (*Peakmaster*¹), a separação dos seguintes AO: acético (Ac), aspártico (As), cítrico (Ci), fórmico (Fo), málico (Ma), oxálico (Ox), pirúvico (Pi), succínico (Su) e tartárico (Ta).

Resultados e Discussão

A otimização baseou-se na análise das curvas de mobilidade efetiva em função do pH para os AO mais o ânion tampão cromóforo (ácido ftálico) com auxílio do simulador *Peakmaster* (Figura 1).

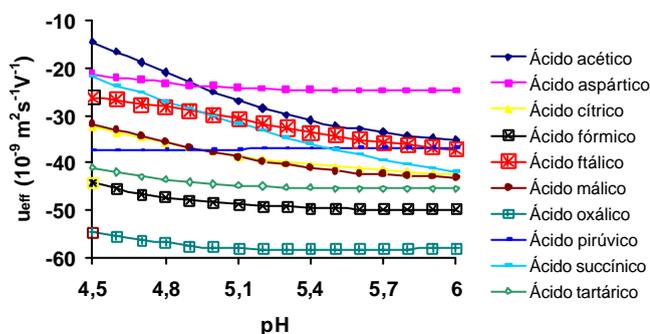


Figura 1. Curvas de mobilidade efetiva x pH.

Entre o pH 5,4 e 5,8 o ftalato apresenta mobilidade intermediária aos AO e poder tamponante considerável. Portanto, realizou-se o planejamento fatorial (PF) com 2 fatores e 3 níveis (Tabela 1) a fim de se estabelecer o melhor pH (ajustado com TRIS) e concentração de tampão para a separação. As condições experimentais tais como voltagem, temperatura no cartucho, tempo de injeção, capilar e a concentração do inversor de fluxo eletrosmótico (CTAB) foram mantidas constantes. O experimento 9 apresentou o melhor resultado. A Figura 2 mostra o eletroferograma simulado (A) e experimental (B) obtido na condição ótima (avaliação qualitativa).

Tabela 1. Planejamento fatorial 3².

Exp.	1	2	3	4	5	6	7	8	9
pH	-	0	+	-	0	+	-	0	+
[ftalato]	-	-	-	0	0	0	+	+	+

pH: (-): 5,4; (0): 5,6; (+): 5,8.

Ácido ftálico: (mmol L⁻¹) (-): 5,0 ; (0): 10,0; (+):15,0

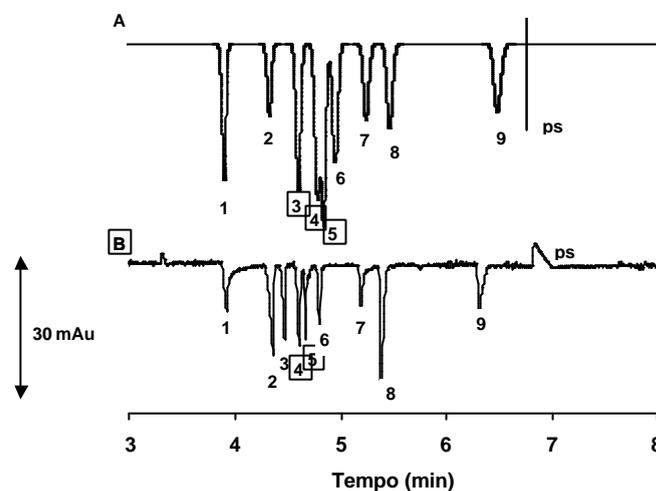


Figura 2. Compostos: 1 - Ox; 2 - Fo; 3 - Ta; 4 - Ma; 5 - Ci; 6 - Su; 7 - Pi; 8 - Ac; 9 - As; ps - pico de sistema. Condições de análise: -10 kV, 25 °C, 230 nm, injeção: 2s x 50 mBar. Eletrólito condutor: 15 mmol L⁻¹ de ftalato ajustado com TRIS (pH 5,8); CTAB 0,2 mmol L⁻¹. Capilar de sílica fundida recoberta com poliimida: 75 µm d.i., 360 µm d.e. e comprimento total de 48,5 cm (efetivo: 40 cm).

Conclusões

A associação entre o PF e o simulador *Peakmaster* é vantajosa, pois minimiza o número de experimentos e maximiza o nível de informação do sistema investigado. Novos estudos com enfoque quantitativo, como avaliação de superfície de resposta e validação deverão ser realizados. Entretanto, os resultados preliminares obtidos indicaram que o método poderá ser aplicado em matrizes de interesse contendo estes AO.

Agradecimentos

UFJF, CNPq, CAPES, FAPEMIG.

¹ *Peakmaster*, disponível em: <http://www.natur.cuni.cz/~gas/>