

Caracterização química de gasóleo extrapesado por CGxCG-EMTdV

Bárbara Marini Fernandez Ávila^{1,a} (PG), Ademário Íris da Silva Junior^{a,c} (PG), André Aguiar^a (PQ), Alexandre Oliveira Gomes^b (PQ), Débora de Almeida Azevedo^a (PQ). * barbamfa@iq.ufrj.br

^a Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro, RJ, 21941-909.

^b CENPES, Petrobras, Rio de Janeiro.

^c IFRJ, Rio de Janeiro.

Palavras-Chave: gasóleo, cromatografia gasosa bidimensional abrangente.

Introdução

O resíduo de vácuo é a fração mais complexa e contém a maioria dos heteroátomos presentes no petróleo. A massa molecular dos constituintes é da ordem de milhares de daltons e a caracterização individual dos compostos por cromatografia gasosa é quase impossível.¹ Neste trabalho, um gasóleo extrapesado (temperatura de corte 550-590°C) de um resíduo de petróleo foi obtido usando uma unidade de destilação molecular.

Desde sua introdução nos anos 90, a cromatografia gasosa bidimensional abrangente (CGxCG) tem mostrado um potencial enorme na investigação de misturas complexas como o petróleo devido ao aumento do poder de resolução.² Nesta técnica, duas colunas de cromatografia gasosa são acopladas, através de um modulador. A separação na coluna apolar da primeira dimensão se baseia na volatilidade dos analitos, enquanto que a separação na coluna polar da segunda dimensão se baseia na polaridade ou estrutura molecular.³ O acoplamento de um sistema CGxCG com um espectrômetro de massas com analisador de massas do tipo Tempo de Voo (EMTdV) é uma ferramenta poderosa na identificação individual dos compostos. Dessa forma, neste trabalho foi feita a caracterização de compostos de amostras de produtos de destilação de alto vácuo da fração de resíduo de vácuo do petróleo por CGxCG-EMTdV.

Parte Experimental

A amostra foi analisada em um sistema CGxCG-EMTdV Leco Pegasus 4D, composto por um CG Agilent 6890, equipado com um forno secundário e um modulador fixo de quatro jatos e dois estágios. Utilizou-se na primeira dimensão uma coluna HP-5 e na segunda dimensão uma coluna DB-17.

Resultados e Discussão

A amostra foi analisada por CG-EM antes de ser analisada por CGxCG-EMTdV. Parafinas, naftaleno, alquilnaftalenos, antraceno, alquilantracenos e hopanóides foram identificados através da comparação dos espectros de massas obtidos experimentalmente com os da literatura. Algumas coeluições foram observadas, como por exemplo,

entre o tridecano e o *terc*-butil-fenol, assim como entre um esterano triarômico C₁₉ e benzilbenzofurano. Na análise por CGxCG-EMTdV essas coeluições foram eliminadas. A Figura 1 ilustra um dos casos da análise da amostra por CGxCG-EMTdV, onde observa-se que os dois picos apresentam o mesmo tempo de retenção na primeira dimensão e a separação entre o tridecano e o *terc*-butil-fenol ocorre na segunda dimensão.

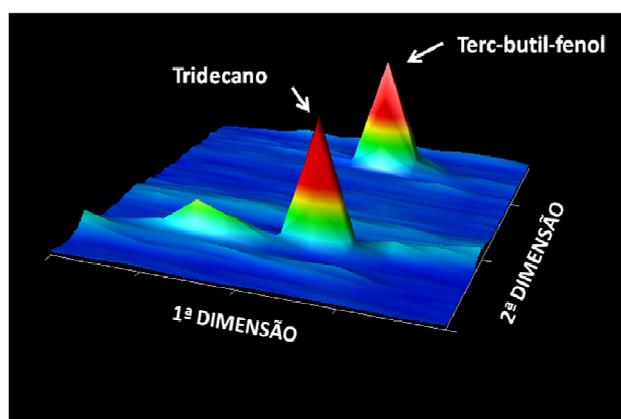


Figura 1. Separação entre tridecano e *terc*-butil-fenol por CGxCG-EMTdV.

Conclusões

Dessa forma, este trabalho ilustra a superioridade da técnica CGxCG-EMTdV, com um aumento da capacidade de separação, do poder de resolução, da sensibilidade e da seletividade, que auxiliam significativamente na identificação individual dos compostos.

Através do uso combinado das técnicas de CG-EM e CGxCG-EMTdV, foi possível a identificação de vários compostos no gasóleo extrapesado, o que ainda não havia sido realizado com este detalhamento.

Agradecimentos

Petrobras, FUJB, CNPq e Capes.

¹ Speight, J. G. *The chemistry and technology of petroleum*, 4th ed., CRC Press: Boca Raton, 2006.

² Vendevre, C.; Ruiz-Guerrero, R.; Bertoncini, F.; Duval, L.; Thiébaud, D. e Hennion, M-C. *J. Chromatogr. A* **2005**, *1086*, 21.

³ van Deursen, M.; Beens, J.; Reijenga, J.; Lipman, P.; Cramers, C. e Blomberg, J. *J. High Resol. Chromatogr.* **2000**, *23*, 507.