

Avaliação da região espectral de sobretons (1000 - 1500 nm) para determinação do teor de biodiesel em misturas biodiesel/diesel

Paulo F. B. de Souza Júnior^{1*} (IC), Liliana de F. B. de Lira² (PG), Claudete F. Pereira³ (PQ), Maria Fernanda Pimentel¹ (PQ), Luiz Stragevitch¹ (PQ).

*paulofbsouza@gmail.com

¹ Departamento de Engenharia Química - Universidade Federal de Pernambuco, Recife-PE, 50.740-521

² Departamento de Química Fundamental - Universidade Federal de Pernambuco, Recife-PE, 50.670-900

³ Departamento de Química – Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa – PB, 58.051-970

Palavras Chave: Biodiesel, misturas biodiesel/diesel, calibração multivariada, espectroscopia NIR.

Introdução

De acordo com o Programa Nacional de Produção e Uso do Biodiesel (PNPB) do Governo Federal, a partir de janeiro de 2008, tornou-se obrigatória em todo território nacional a mistura 2% de biodiesel e 98% de diesel (B2). Portanto, o desenvolvimento de métodos e instrumentação analítica de baixo custo para análise das misturas biodiesel/diesel faz-se necessária. O presente trabalho descreve o uso de regiões de sobretons NIR na determinação do teor de biodiesel em misturas biodiesel/diesel, visando sua aplicação no desenvolvimento de instrumentação analítica portátil e de baixo custo.

Experimental

Os espectros NIR de 57 misturas de biodiesel/diesel (1,0 – 5,0% m/m) foram registrados na faixa espectral de 1000 – 1500 nm, utilizando-se um caminho óptico de 10 mm, um espectrômetro FT-IR Perkin Elmer modelo Spectrum GX (média de 16 varreduras e resolução de 8,0 cm⁻¹). Os modelos de calibração multivariada PLS (Mínimos Quadrados Parciais) foram construídos utilizando-se 38 amostras de calibração e 19 amostras de validação externa. Foi utilizado o método de validação cruzada total e utilizados espectros de primeira derivada com filtros de Savitzky-Golay e polinômio de segunda ordem (janela de 7 pontos).

Resultados e Discussão

A Figura 1 mostra os espectros NIR para uma mistura B2 e uma amostra de diesel. São observadas bandas entre 1300 e 1500 nm (primeiro sobreton das bandas de combinação das ligações C – H) e 1100 e 1300 nm (segundo sobreton dos modos de estiramento das ligações C – H). O modelo PLS construído com essa região espectral apresentou RMSEP de 0,18% (m/m) para o teor de biodiesel em amostras de previsão não incluídas na etapa de calibração. O coeficiente de correlação obtido foi de 0,99 (Figura 2). Tais resultados são comparáveis aos descritos por Pimentel *et al.* [1] e Oliveira *et al.* [2], nos quais foi incluída a região espectral das bandas de combinação e utilizados

caminhos ópticos inferiores: 1,0 e 2,0 mm, respectivamente.

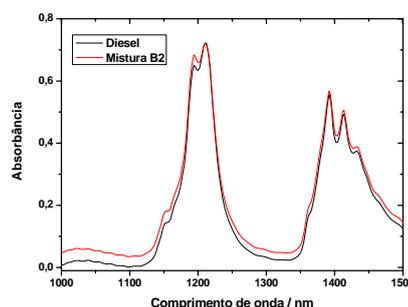


Figura 1. Espectros NIR para uma mistura B2 e uma amostra de diesel. Caminho óptico: 10 mm.

Os resultados obtidos demonstram a aplicabilidade dessa região espectral, cujos acessórios ópticos apresentam menor custo e o desenvolvimento de instrumentação analítica portátil para determinação de parâmetros de qualidade de biodiesel torna-se mais viável.

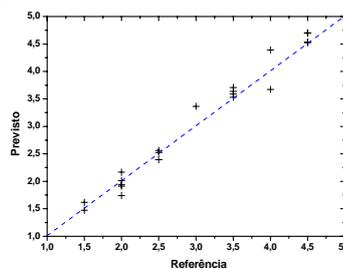


Figura 2. Curva de valores previstos em função dos valores de referência para teor de biodiesel em misturas biodiesel/diesel (% m/m).

Conclusões

Foi demonstrada a aplicabilidade da espectroscopia NIR, na região de sobretons (1000 – 1500 nm), à determinação do teor de biodiesel em misturas biodiesel/diesel.

Agradecimentos

CNPq, CAPES/PROCAD, FINEP/CTPETRO, BNB.

¹ Pimentel, M. F.; Ribeiro, G. M. G. S.; Cruz, R. S.; Stragevitch, L.; Pacheco Filho, J. G.A.; Teixeira, L. S. G. *Microchem. Journal*, **2006**, 82, 201.

² Oliveira, J. S.; Montalvão, R.; Daher, L.; Suarez, P. A. Z.; Rubim, J. C. *Talanta*, **2006**, 69, 1278.