

# Avaliação de misturas de biodieseis metílicos através da Análise de Componentes Principais dos dados de RMN de $^1\text{H}$

Igor S. Flores (PG), Mariana da S. Godinho (PG), Anselmo E. Oliveira (PQ), Glauca B. Alcantara (PQ), Luciano M. Lião\* (PQ). \*luciano@quimica.ufg.br

<sup>1</sup>Laboratório de RMN, Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, C.P. 131, 74001-970, Goiânia, GO.

Palavras Chave: Biodiesel, RMN, PCA

## Introdução

O biodiesel é constituído de alquil ésteres de ácidos graxos. O método comumente utilizado para sua produção é a transesterificação de ácidos graxos obtidos a partir de recursos renováveis, de origem animal e vegetal. Em escala industrial, a produção de biodiesel é feita principalmente utilizando óleos vegetais virgens. Entretanto, o alto preço dessas matérias-primas representa um grande obstáculo para a corrente produção. Além de questões econômicas, as propriedades do biodiesel devem obedecer aos padrões de qualidade estabelecidos, sendo essas alcançadas isoladamente ou em misturas de matérias-primas que proporcionem adequação a estas propriedades desejadas. Logo, há a necessidade de discriminação tanto da fonte utilizada na produção do biodiesel, quanto da existência de mistura entre elas, e nesse caso, determinar a proporção. A utilização da técnica de RMN de  $^1\text{H}$  mostra-se vantajosa, pois apresenta rapidez na análise, necessita de pequena quantidade de amostra, é um método não destrutivo e sua aplicação é adequada a biomoléculas. Já o uso da Análise de Componentes Principais (PCA) se deve a grande aplicabilidade deste método estatístico em diversas áreas e por conseguir extrair do conjunto de dados originais informações relevantes que tornam possível a discriminação de fontes naturais utilizadas na produção do biodiesel, que é o objetivo deste trabalho.

## Resultados e Discussão

Nesse estudo, utilizaram-se amostras de biodiesel metílico de algodão, amendoim, mamona, pinhão manso, sebo e soja. As amostras foram analisadas separadamente e em combinações binárias na proporção de 20:80, 40:60, 60:40 e 80:20% (v/v) totalizando 66 combinações. Os espectros de RMN de  $^1\text{H}$  foram adquiridos em triplicata, num espectrômetro Bruker AVANCE III 500. Os dados espectrais foram pré-tratados usando o alisamento Savitsky-Golay no programa *Scilab*. O resultado da PCA mostrou a discriminação do biodiesel metílico de mamona, independente do seu teor, dos demais biodieseis, na faixa entre  $\delta$  5,29-5,57, como demonstrado na figura 1, em destaque (cor azul).

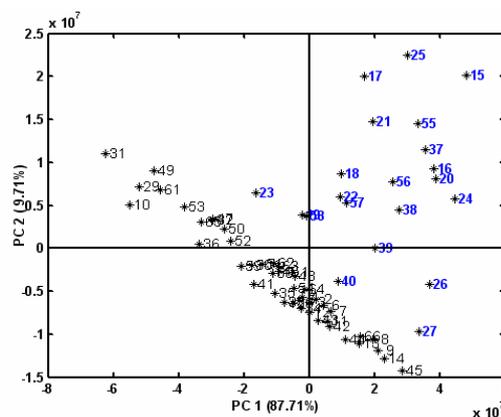


Figura 1. Gráfico dos escores de PC1 e PC2 com 97,4% de variância explicada.

O mesmo resultado foi obtido para o biodiesel de soja em relação aos demais, na faixa 2.74-2.83 ppm, como demonstrado na figura 2 em vermelho.

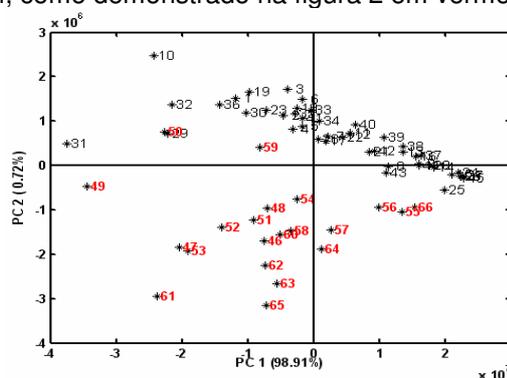


Figura 2. Gráfico dos escores de PC1 e PC2 com 99,6% de variância explicada.

Dessa forma, a exclusão individual dos biodieseis da matriz, leva à identificação completa dos componentes da mistura.

## Conclusões

A utilização da PCA com seleção de determinadas faixas do espectro de RMN, mostrou ser uma ferramenta de grande utilidade para avaliação de misturas de biodieseis de fontes diversas, sendo, portanto uma ferramenta para identificação de possíveis adulterações.

## Agradecimentos

Ao MCT/FINEP/CT-INFRA, à FUNAPE/UFG, ao CNPq e à CAPES pelo apoio financeiro.