

Avaliação de tendências de correlações entre espectros de ressonância magnética nuclear de ^1H e parâmetros de qualidade de óleos vegetais

Gustavo G. Shimamoto^{1*} (PG), Patricia T. de Souza¹ (PG), Matthieu Tubino¹ (PQ)

¹Instituto de Química – UNICAMP, CP 6154, CEP 13083-970, Campinas-SP, Brasil. *e-mail: gustavo@iqm.unicamp.br

Palavras Chave: óleos vegetais, ressonância magnética nuclear, parâmetros de qualidade, correlações.

Introdução

A ressonância magnética nuclear (RMN) é uma técnica que traz informações sobre a fórmula molecular, estrutural e geométrica de compostos orgânicos. Neste contexto, o presente trabalho propõe uma avaliação exploratória de tendências de correlações entre os espectros de RMN de hidrogênio (RMN ^1H) e parâmetros de qualidade de óleos vegetais como densidade, viscosidade e estabilidade oxidativa. Esses parâmetros são importantes, sobretudo quando os óleos são utilizados como matéria prima para a produção de biodiesel, pois este biocombustível deve seguir especificações impostas pela Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP).

Parte Experimental

Foram utilizados óleos vegetais de girassol, canola, soja e milho, adquiridos no comércio de Campinas-SP. Para a obtenção dos espectros de RMN ^1H , 20 μL de cada óleo foram dissolvidos em 700 μL de CDCl_3 e os espectros (-4,00 a 16,00 ppm) foram obtidos no espectrômetro de RMN Bruker Avance III 500 MHz (frequência para ^1H). As medidas de densidade e viscosidade foram obtidas a 40 $^\circ\text{C}$, respectivamente nos equipamento densímetro DMA 4500 (Anton Paar) e viscosímetro AMVn (Anton Paar). A estabilidade oxidativa foi obtida a partir do 873 Biodiesel Rancimat (Metrohm Pensalab). Para isto, cerca de 3 g de amostra foram submetidas a 110 $^\circ\text{C}$ sob fluxo de ar de 10 L h^{-1} .

Resultados e Discussão

Observaram-se tendências de correlações em dois sinais do espectro de RMN. O primeiro, em 1,3 ppm está relacionado aos hidrogênios da cadeia linear dos ésteres ($-\text{CH}_2-$). Já o em 5,4 ppm representa os hidrogênios olefínicos ($-\text{CH}=\text{CH}-$). A Figura 1 apresenta as tendências observadas. De forma geral, para maiores valores de integral do sinal em 1,3 ppm, ou seja, quanto maior a cadeia linear dos ésteres, observou-se maiores valores de viscosidade e estabilidade oxidativa e menores de densidade. Em relação ao sinal em 5,4 ppm, pôde-se notar que maiores quantidades de hidrogênios olefínicos, ou seja, quanto mais insaturações o óleo tiver apresentaram maiores valores para a densidade e menores valores para a viscosidade e de estabilidade oxidativa.

37^ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

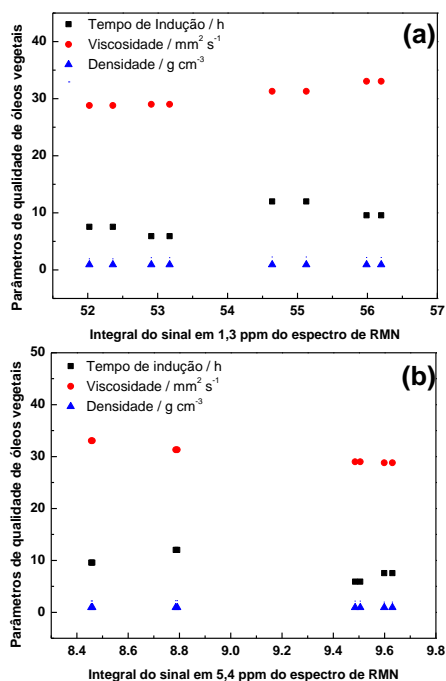


Figura 1. Tendências de correlações observadas com o espectro de RMN em (a) 1,3 ppm e (b) 5,4 ppm.

O tamanho da cadeia e a quantidade de ligações duplas influenciam na densidade e na viscosidade principalmente pela diferença nas interações intermoleculares. Já a estabilidade oxidativa diminui com o aumento da quantidade de insaturações, pois o mecanismo para a oxidação lipídica pode iniciar-se com a retirada de um hidrogênio alílico.

Conclusões

Há tendências de correlações entre sinais do espectro de RMN e propriedades como viscosidade, densidade e estabilidade oxidativa. Com isto, pode ser possível inferir qualitativamente acerca dessas características a partir de espectros de RMN e gera perspectivas para a criação de modelos quantitativos. Em contrapartida, a RMN é uma técnica complexa, que exige analista qualificado e com custo de manutenção relativamente alto.

Agradecimentos

Ao CNPq, pelo financiamento do projeto.

¹ Corsini, M. S.; Jorge, N., *Ciênc. Tecnol. Aliment.* **2006**, *26*, 27.