Discriminação das frações obtidas da corrida cromatográfica do biodiesel por FTIR e análise covariante de dados

Humbervania R. G. da Silva[1] (PG); Marilena Meira[2] (PQ); Cristina M. Quintella[1] (PQ)*

cris5000tina@gmail.com

[1]*Universidade Federal da Bahia, Campus Universitário de Ondina. Rua Barão de Jeremoabo, Instituto de Química, CEP: 40.170-290, Salvador-Ba.*

[2]*IFBA-Campus Simões Filho, Av. Universitária sn. Pitanguinha - Simões Filho - Ba.*

Palavras Chave: *Biodiesel, Fluorescência, Moléculas, FTIR, PCA.*

Abstract

Identification of molecules responsible for biodiesel fluorescence effect by spectroscopy and analysis multivariate. This study aims to discriminate the fractions obtained from the chromatographic run biodiesel by FTIR associated with PCA.

Introdução

Os óleos vegetais são constituídos principalmente por triacilgliceróis e de uma mistura de compostos de baixas concentrações. Esses compostos minoritários sofrem alterações quando são submetidos a processos de esterificação. É importante determinar esses constituintes para se avaliar a qualidade analítica e detectar possíveis adulterações [1]. Esse trabalho tem como objetivo discriminar as frações obtidas na corrida cromatográfica do biodiesel por FTIR associado à PCA para uma futura identificação e quantificação dos compostos fluorescentes presentes no biodiesel.

Resultados e Discussão

O biodiesel de soja foi submetido à cromatografia em coluna (CC) de sílica gel e como eluente foi utilizado a mistura de hexano/ácido acético (9:1). Foi recolhido dessa coluna um total de 86 frações. Estas foram deixadas secar e foram feitas análises por FTIR, em seguida foram analisados os espectros e rodado PCA para agrupamento das subfrações das amostras. As Figuras 1 e 2 mostram respectivamente as PCA das frações do biodiesel, a Figura 1 mostra a PCA das 31 primeiras frações e a Figura 2 a PCA das frações 32 a 86, as PCAs foram rodadas por grupos de amostras levando em consideração o tempo de evaporação dos solventes e de forma em que se obtivesse uma melhor separação. Foram analisados os espectros de FTIR de cada grupo de amostras e na Figura 3 está representado um espectro de cada grupo formado na PCA. Também foi feito a interpretação de cada espectro obtidos nas frações de 32 a 86.

Figura 1. PCA dos espectros de FTIR das frações (1 a 31) obtidas na separação do biodiesel de soja

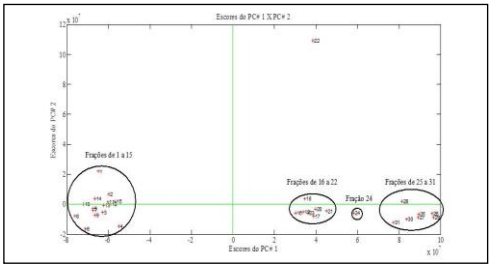


Figura 2. PCA dos espectros das frações (32 a 86) obtidas na separação do biodiesel

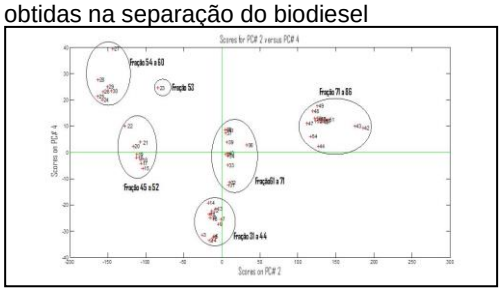
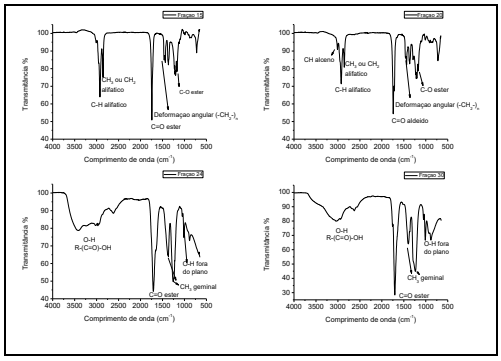


Figura 3. Espectros de FTIR das frações (1 a 31) obtidas na CC do biodiesel



Conclusões

A partir da análise de componentes principais foi possível agrupar espectros semelhantes das frações obtidas do biodiesel. Pela espectroscopia de infravermelho foi possível identificara presença de linolenato e oleato no biodiesel.

Agradecimentos

CNPQ, UFBA, LabLaser.

[1] Moreda, W.; Cert, A.; Pérez-Camino, A. C.; Chromatographic analysis of minor constituents in vegetable oils. Journal of Chromatography A, v. 881, p. 131-148, 2000.