



Aplicação de Espectroscopia Raman no monitoramento da síntese de biodiesel

Rodrigo P. Bagarolo*, Adriano G. P. da Silva, Harrson S. Santana e Osvaldir P. Taranto

Resumo

O biodiesel representa uma alternativa importante na busca de novos combustíveis, visto ser uma fonte de energia renovável, além de contribuir menos para o efeito estufa. Com intuito de avaliar os efeitos das variáveis do processo de síntese do biodiesel, é realizada a identificação dos componentes deste. A espectroscopia Raman permite o monitoramento em tempo real de processos químicos, sendo uma alternativa viável para o monitoramento proposto. Esse trabalho, portanto, buscou estudar a aplicação da espectroscopia Raman para monitorar, quantificar e qualificar o processo de síntese do biodiesel.

Palavras-chave:

Biodiesel, microrreatores, Raman.

Introdução

Um dos maiores benefícios da aplicação da espectroscopia Raman consiste na obtenção fácil e rápida de informação, além de ser uma técnica não invasiva, apresentando mínima interferência na amostra analisada (Goh et al., 2017). Dessa forma, o objetivo deste trabalho consistiu na aplicação da espectroscopia Raman na identificação e quantificação de compostos presentes na reação de síntese do biodiesel. Foram analisadas amostras de etanol e óleo nas condições de batelada e *in situ* (escoando em um microdispositivo de PDMS), além de amostras de óleo e biodiesel em batelada.

Resultados e Discussão

O equipamento utilizado foi o espectrômetro Avantes AvaSpec-ULS2048I-TEC-RS-USB2, com laser de 785 nm. A configuração adotada para obtenção dos dados foi tempo de integração de 15 s com 3 médias, suavização 2 e potência do laser igual a 880 mV para as amostras etanol/óleo e 500 mV para óleo/biodiesel. Os dados foram analisados no intervalo 800-1800 cm^{-1} para etanol/óleo e 0-3200 cm^{-1} para óleo/biodiesel.

As Figuras 1, 2 e 3 contêm os espectros obtidos para as amostras etanol/óleo, em batelada e *in situ*, e para as amostras óleo/biodiesel, respectivamente. A Tabela 1 indica os coeficientes de determinação resultantes da análise multivariada (PLS) em cada conjunto de dados.

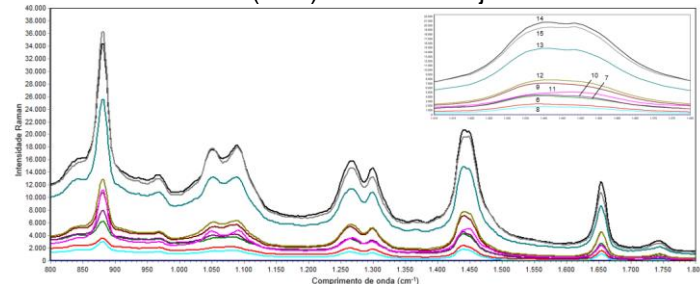


Figura 1. Espectros das misturas etanol/óleo em batelada, com razões molares de 6-15.

Os espectros, em cada figura, apresentaram uniformidade para as diferentes leituras, podendo-se, assim, identificar os compostos presentes por meio de seus picos característicos. Além disso, os elevados coeficientes de determinação presentes na Tabela 1, indicam a possibilidade de se prever corretamente as concentrações dos compostos em cada amostra.

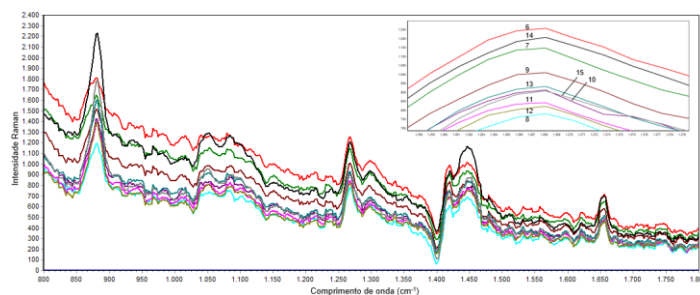


Figura 2. Espectros das misturas etanol/óleo *in situ*, com razões molares de 6-15.

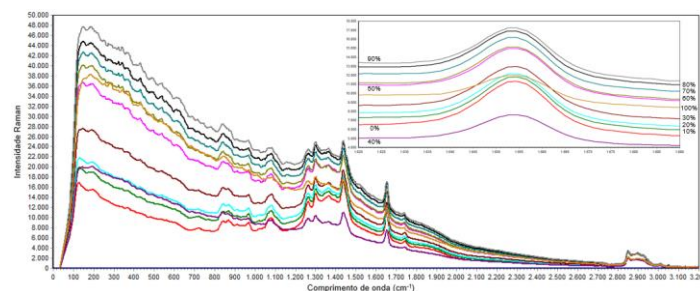


Figura 3. Espectros das misturas óleo/biodiesel em batelada, com concentrações volumétricas de 0-100%.

Tabela 1. Coeficientes de determinação. Calibração (R^2c) e Validação (R^2v).

Leitura	Pré-tratamento	R^2c	R^2v
Etanol/óleo (batelada)	2ª derivada	0,973	0,883
Etanol/óleo (<i>in-situ</i>)	1ª derivada	0,996	0,927
Óleo/biodiesel	-	0,999	0,983

Conclusões

Nesse trabalho foi desenvolvida uma metodologia para a aplicação da técnica de espectroscopia Raman, sendo possível a obtenção de espectros de amostras de etanol/óleo e óleo/biodiesel, possibilitando identificar e quantificar os compostos presentes nas misturas.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoa de Nível Superior (CAPES) e Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP, Processo 2016/20842-4).