

# 1. Introdução

A gasolina automotiva é uma mistura complexa de hidrocarbonetos que apresentam de quatro a doze átomos de carbono. Os hidrocarbonetos componentes da gasolina são membros das séries parafínica, naftênica e aromática, e cujas proporções relativas dependem dos petróleos e processos de produção utilizados, Campos, Antônio C. et al (1)

As gasolinas comerciais são formuladas para atender a requisitos de desempenho dos motores, atenuar as emissões de gases poluentes, exigindo um rígido controle destas características para atender as especificações estabelecidas pelos órgãos normativos.

Diversos métodos de análise são propostos para a determinação quantitativa de propriedades importantes das gasolinas.

Um deles é o índice de octano, que especificações da ANP, Agência Nacional de Petróleo, órgão regulador de combustíveis, é determinado pelo método MB-457, correspondente ao método ASTM D-2700. Estes procedimentos exigem um volume grande de amostra e rígido controle de condições para serem realizados. Estes aspectos demandam o desenvolvimento de pesquisas para o estabelecimento de procedimentos que sejam não destrutivos, de menor custo e que exijam menos tempo de realização, para serem aplicados no controle de qualidade durante a produção e no laboratório para certificar o produto acabado.

Devido à proibição do chumbo tetraetila passou-se a usar aditivos químicos alternativos para o aumento da octanagem das gasolinas, como por exemplo, o etanol cuja análise é feita pelo método da proveta, NBR 13992 Embora, na literatura, encontre-se referências a métodos instrumentais para a análise do etanol na gasolina, tais como, fluorescência no ultra violeta, infravermelho, ressonância magnética nuclear, cromatografia gasosa acoplada com espectrometria de massa. Neste trabalho visou-se estabelecer condições para a avaliação quantitativa de propriedades de gasolinas comerciais, tais como, índice de octano, MON, RON, densidade, pontos de ebulição em diversos percentuais de volume destilado da

## 1. Introdução

gasolina e os teores de etanol, saturados, aromáticos e olefinas por espectrometria Raman com transformada de Fourier, para o estabelecimento de modelos preditivos ajustando-se os dados por mínimos quadrados parciais (PLS).

A espectroscopia Raman fundamenta-se no espalhamento da radiação quando um trem de radiação monocromática incide em uma célula contendo uma substância transparente. A radiação espalhada pela amostra é dirigida para um interferômetro que permite medir todas as frequências simultaneamente. O interferograma obtido não pode ser interpretado em sua forma original, e sim através de uma transformada de Fourier, no caso do equipamento usado, Nicolet 950 FT-Raman, que o converte em um espectro no qual se pode identificar e quantificar os constituintes da amostra em análise, Walker, S et al (2)

Em uma mistura analisada na espectroscopia Raman, os espectros tendem a apresentar picos mais nítidos do que aqueles obtidos pelo infravermelho pois a superposição de bandas é menor, sendo mais fácil na espectroscopia Raman realizar medidas quantitativas.

Na técnica Raman como em outras técnicas instrumentais, os dados adquiridos, raramente, permitem extrair informações diretas úteis. Sendo assim dados de intensidades de espalhamento fornecidos pelos espectros Raman, devidamente preparados, foram tratados por regressão de mínimos quadrados parciais, visando estabelecer modelos de ajuste entre as variáveis preditoras (intensidades Raman) e as variáveis respostas (propriedades em estudo) das gasolinas e misturas sintéticas.

Em resumo, os objetivos deste trabalho foram:

- i) Adquirir espectros Raman com transformada de Fourier de misturas sintéticas e gasolinas comerciais.
- ii) Correlacionar as propriedades de interesse das misturas sintéticas, isto é, os teores em massa, de n-heptano, isooctano, ciclo-hexano, ciclo-hexeno, benzeno, tolueno, o-xileno, p-xileno e etanol com as intensidades das linhas espectrais Raman.
- iii) Correlacionar as propriedades de gasolinas comerciais, ou seja, os teores de benzeno, aromáticos, saturados, olefinas e etanol; pontos de ebulição final e das frações evaporadas de 10%, 50% e 90%; densidade relativa; MON, RON e índice antidetonante, com as intensidades das linhas espectrais Raman.

- iv) Estabelecer modelos preditivos das propriedades citadas, aplicando-se a regressão por mínimos quadrados parciais (PLS) às variáveis predictoras (as intensidades Raman) e respostas (as propriedades estudadas).