

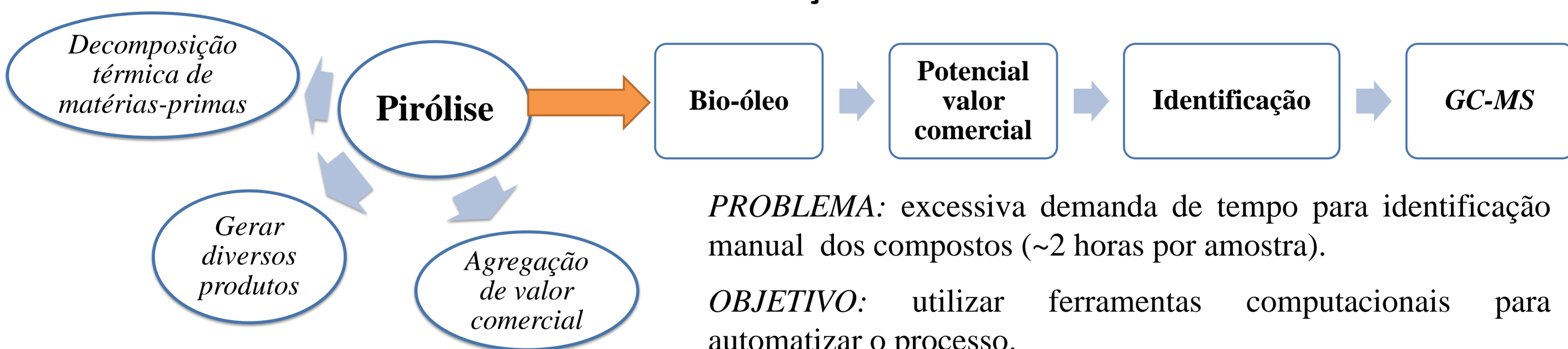


## Automação do processo de identificação de compostos de bio-óleo resultante de pirólise rápida

Tiago Casagrande  
Prof. Dr. Jorge Otávio Trierweiler



### INTRODUÇÃO



### METODOLOGIA

A identificação de padrões do MS indica compostos prováveis.

O GC indica o índice de retenção do pico estudado.

Column type	Active phase	I	Reference	Comment
Capillary	RTX-5	981.4	Ádámová, Orinák, et al., 2005	30. m/0.25 mm/0.25 µm, N2, 40. C @ 2. min, 5. K/min, 300. C @ 10. min
Capillary	CP-Sil 8CB-MS	992	Hierro, de la Hoz, et al., 2004	60. m/0.25 mm/0.25 µm, 40. C @ 2. min, 4. K/min, 280. C @ 5. min
Capillary	HP-5MS	981	Lalel, Singh, et al., 2003	60. m/0.25 mm/0.25 µm, He, 40. C @ 1. min, 3. K/min, 310. C @ 20. min
Capillary	DB-1	959.6	Sun and Stremple, 2003	30. m/0.25 mm/0.25 µm, He, 3. K/min; T <sub>start</sub> : 40. C; T <sub>end</sub> : 325. C
Capillary	DB-5	978.8	Xu, van Stee, et al., 2003	30. m/0.25 mm/1. µm, He, 2.5 K/min; T <sub>start</sub> : 50. C; T <sub>end</sub> : 200. C

O software (implementado em Python) busca na literatura os índices de retenção dos compostos indicados pelo MS e os compara aos indicados pelo GC, chegando-se assim ao resultado.

Figura 1. Algoritmo simplificado do sistema de identificação.

### RESULTADOS

- Grande semelhança entre os testes realizados com o programa e aqueles obtidos manualmente;
- Tempo estimado na identificação ~3 segundos por composto.

```
Compound 1 identified
IRexp = 970.22980959
IRbanco = 978.8
Compound = Phenol
---
Compound 2 identified
IRexp = 1266.82675815
IRbanco = 1272.0
Compound = Cyclohexanol, 1-methyl-4-(1-methylethenyl)-, acetate
```

Figura 2. Demonstrativo de resultados obtidos em teste.

### CONCLUSÕES

- A automação apresentada é uma ferramenta potencial para auxiliar na identificação de compostos por GC-MS;
- Processo automático, reduzindo de aproximadamente 2 h para apenas 120 s o tempo de identificação;
- A sensibilidade da comparação pode ser ajustada, tornando a ferramenta mais versátil.