

Você sabe o que é petroleômica?

Pesquisadora caracteriza petróleo por meio de técnicas em espectrometria de massas

JEVERSON BARBIERI
jeverson@unicamp.br

A caracterização de petróleo e óleos vegetais, utilizando técnicas modernas em espectrometria de massas, rendeu à pesquisadora Rosineide Costa Simas, do Instituto de Química (IQ) da Unicamp, a primeira tese de doutorado na área de petroleômica – área de fronteira do desenvolvimento científico em Química Analítica –, em nível mundial. De acordo com o orientador da pesquisa e coordenador do Laboratório ThoMSon de Espectrometria de Massas, Marcos N. Eberlin, trata-se dos primeiros resultados dos projetos estabelecidos pelo seu Laboratório com as redes temáticas da Petrobras e a Agência Nacional do Petróleo (ANP). Para ele, essa parceria estabeleceu um novo e eficaz modelo de financiamento de pesquisas e teses expandindo, dessa maneira, as possibilidades de formação de recursos humanos altamente qualificados no Brasil. “Em poucos anos tivemos um salto de qualidade no nosso Laboratório, conseguindo nos estabelecer como um dos melhores grupos do mundo nesta área”, comemorou Eberlin.

E, na sequência, prosseguiu o coordenador, até meados de 2011, mais quatro alunos defenderão o doutorado nessa mesma área. Yuri Eberlin de Corilo, sobre a criação do software PetroMS; Clécio Fernando Klitzke abordará o assunto ‘ácidos em petróleo’; Boniek Gontijo Vaz tratará sobre evolução térmica em petróleo e hidrotreamento em diesel, além de Rosana Maria Alberici que pesquisou sobre a biodegradação em petróleo.

As redes foram estabelecidas com recursos financeiros destinados a um objetivo muito nobre: o de impulsionar o desenvolvimento da ciência e a tecnologia do Brasil. “A ciência pelo lado da academia e a tecnologia pelo lado da Petrobras”, detalhou. Várias redes se formaram no país como um todo e, especificamente no projeto do ThoMSon, com uma meta bastante desafiadora. A partir da mistura mais complexa do ponto de vista químico existente em nosso planeta, que é o petróleo, realizar a sua caracterização de forma bastante rápida e eficiente com instrumentação e tecnologia de ponta. “Coisa que só existia, há poucos anos, em um laboratório localizado na Flórida (EUA)”, disse. Para isso, toda a infraestrutura desejável foi fornecida pela Petrobras, como bolsas de estudo, material, equipamentos, além da possibilidade de intercâmbios nacionais e internacionais.

Misturas complexas

O trabalho de Simas consistiu em caracterizar o petróleo por compostos polares, ou seja, fazer uma análise detalhada de sua fração mínima (5%), utilizando a técnica Easy Ambient Sonicspray Ionization (EASI), desenvolvida pelo Laboratório ThoMSon e capaz de analisar qualquer tipo de superfície



Rosineide Costa Simas, autora da pesquisa, durante a sua defesa de tese: área de fronteira em Química Analítica

utilizando a espectrometria de massas. Através dela, foi possível verificar principalmente os marcadores moleculares de óleos e petróleo. “A minha tese versou sobre a inovação na amostragem e a confiança metrológica desta nova técnica, a petroleômica. E aí está contido o ineditismo desse trabalho”, afirmou.

A pesquisadora relatou que esses compostos polares, estudados já há algumas décadas, eram observados apenas como resultado de uma análise elementar. Sabia-se da composição de nitrogênio, oxigênio e enxofre básica do petróleo. No entanto, eram dados brutos de baixa relevância para o refino e tratamento do petróleo. Através da alta resolução e exatidão, aliadas a altas velocidades de análise garantidas pela espectrometria de massas, surgiu a possibilidade de conhecer a fundo os compostos nitrogenados, oxigenados e sulfurados do petróleo e ordená-los por classes. O que antes era quase desconhecido, agora se mostra como um conjunto de mais de mil compostos nitrogenados e cerca de 800 oxigenados e sulfurados. “Conhecer essas estruturas dos polares, a partir do que se já conhece da indústria petrolífera, correlacionar e descobrir todas as potencialidades desta técnica é que chamamos de ‘petroleômica MS’, ou seja, é a caracterização do petróleo de uma forma global”, revelou Simas.

Ademais, prosseguiu a pesquisadora, a técnica da petroleômica



O professor Marcos N. Eberlin, coordenador do Laboratório ThoMSon: formação de recursos humanos altamente qualificados

por espectrometria de massas tem dado uma grande contribuição para que se conheçam todas as transformações ocorridas com o petróleo na sua extração, refino e tratamento. “Analisamos os compostos polares porque sabemos que eles funcionam como marcadores químicos, ou como uma verdadeira memória química, que guarda informações sobre a história e as propriedades do óleo, quando os dados são corretamente interpretados juntamente com o pessoal técnico da Petrobras e todo o seu conhecimento geo-químico”, afirmou a pesquisadora.

Quando uma nova amostra de petróleo chega a uma refinaria, passa por uma bateria de testes, entre eles, ponto de maturação, biodegradação, acidez e corrosão. O objetivo é ter o máximo de conhecimento sobre os aspectos físico-químicos do petróleo, mas esses testes demoram semanas. Com a técnica EASI e um software também inovador e de alta eficiência desenvolvido por um dos pesquisadores da equipe, o doutorando Yuri E. Corilo, em apenas dez minutos essa análise é realizada e processada em segundos.

A pesquisa de Simas em conjunto com os pesquisadores do laboratório ThoMSon, entre eles Heliara L. Nascimento, e os doutorandos Clecio F. Klitzke, Yuri E. Corilo e Boniek G. Vaz e da Petrobras, Rosana Cardoso e Eugenio V. Santos Neto, recebeu destaque internacional como capa do *Analytical Chemistry*, o mais importante periódico da área, editado pela American Chemical Society (ACS). “Somente trabalhos de ponta são publicados nessa revista e, destes, apenas alguns são destacados para aparecer na sua capa, privilégio de poucos”, disse Eberlin.

Óleos

A parceria com o professor Daniel Barreira Arellano, do Laboratório de Óleos e Gorduras da Faculdade de Engenharia de Alimentos (FEA), culminou também com a determinação, em segundos, por meio de uma gota de óleo em um papel, do perfil químico destes óleos. Por esse perfil é possível dizer se é óleo de soja, de oliva, de canola, de milho ou de algodão, entre outros, extrapolando para óleos amazônicos como o cupuaçu, copaíba e murumuru. Ou seja, existe uma distribuição de triacilgliceróis característica de cada óleo e, com uma gota, é possível dizer qual oleaginoso deu origem àquele óleo. É possível ainda obter dados para o controle de qualidade, sabendo, por exemplo, se o óleo está fresco ou degradado. Todo óleo que passa por um processo de refino tem também uma acidez natural chamada de acidez livre. “Conseguimos com EASI-MS tipificar o óleo, medir níveis de oxidação e determinar a acidez livre em segundos com muita facilidade, e com precisão e exatidão similares aos métodos clássicos”, exemplificou Simas.

O trabalho resultante dessa pesquisa foi apresentado no V Simpósio Internacional Tendências e Inovações em Tecnologia de Óleos e Gorduras, realizado em Campinas em setembro, e conquistou o 2º lugar como menção honrosa, prêmio BUNGE-SBOG de inovação tecnológica. O evento foi organizado pela Sociedade Brasileira de Óleos e Gorduras (SBOG).

Publicação

Tese de doutorado “Caracterização de Óleos Vegetais e Petróleo por Espectrometria de Massas em Condições Ambiente e com Alta Exatidão e Resolução”
Autora: Rosineide Costa Simas
Orientador: Marcos N. Eberlin
Unidade: Instituto de Química (IQ)
Fonte de financiamento: Petrobras