

Análise de padrões puros e misturas de *n*-parafinas e frações de saturados por APCI(+) Orbitrap MS

Fabricio R. Pereira^{1*} (PG), Lays Rafalsky¹ (PG), Pedro E. M. Rosemberg² (IC), Lindamara M. de Souza^{1,2} (PQ), Valdemar Lacerda Jr.¹ (PQ), Wanderson Romão² (PQ)

*fabricio.r.pereira@gmail.com

¹Universidade Federal do Espírito Santo (UFES), 29075-910, Vitória – ES, Brasil.

²Instituto Federal do Espírito Santo (IFES), 29106-010, Vila Velha – ES, Brasil.

Palavras-chave: *n*-parafinas, espectrometria de massas, APCI, Orbitrap, petróleo, *n*-alcanos.

Introdução

As *n*-Parafinas (C_nH_{2n+2}) são componentes das frações saturadas do petróleo, tendo importante papel na caracterização e controle de processos de refino e escoamento.¹ A detecção e diferenciação dessas espécies em misturas complexas ainda representa desafios analíticos, especialmente para cadeias longas e pouco voláteis.² A espectrometria de massas de alta resolução (HRMS), acoplada fonte de ionização química à pressão atmosférica (APCI) no modo positivo de ionização, pode ser utilizada como alternativa para análise direta de parafinas, evitando degradação térmica típica de técnicas com ionização mais energética.³ O objetivo foi avaliar a eficiência de ionização de parafinas por APCI(+) Orbitrap MS.

Resultados e Discussão

Padrões individuais e misturas de *n*-parafinas foram estudados por fonte APCI(+) acoplada ao Orbitrap MS. Inicialmente, o padrão octatriacontano foi utilizado para otimização dos parâmetros instrumentais. Os espectros foram adquiridos na faixa de m/z 200–1000 Da e foi obtida uma resolução (R) de 289.941 para o pico correspondente ao octatriacontano, m/z 533. A literatura relata, principalmente, análises de parafinas usando o analisador de massas FT-ICR MS.^{4,5} Por APCI(+) Orbitrap MS obteve-se resultados semelhantes (Tabela 1).

Tabela 1. Resultados dos padrões de parafina analisados por APCI(+) Orbitrap MS.

Padrão	m/z medido	m/z teórico	Erro (ppm)	Íon
Hexaconsano	365,41352	365.41418	-0,53	$[C_{26}H_{54}-H]^+$
Octaconsano	393,44487	393.44548	-0,75	$[C_{28}H_{58}-H]^+$
Triacantano	421,47618	421.47678	-1,17	$[C_{30}H_{62}-H]^+$
Hexatriacontano	505,57041	505.57068	-1,42	$[C_{36}H_{74}-H]^+$
Octatriacontano	533,60158	533.60198	-1,55	$[C_{38}H_{78}-H]^+$
Tetracontano	561,63262	561.63328	-1,80	$[C_{40}H_{82}-H]^+$

Fonte: Autores, 2025.

Conclusões

A metodologia mostrou-se eficiente na detecção direta de parafinas puras por APCI(+) Orbitrap MS. A análise de padrões de parafinas e misturas parafínicas apresentou erros menores do que -0,53 ppm e alta resolução de massas (> 290.000).

Agradecimentos

Ao CMVV IFES, CENPES-Petrobras, NCPQ/LabPetro, PPGQ/UFES, FAPES e CAPES pelo apoio.

¹ Oliveira, A. M. de; Castiblanco, J. E. B.; Fleming, F. P.; Souza, E. N. R. e Hantao, L. W. Energy Fuels 34, 10705, 2020.

² Tien, R.; Bernsmann, T.; Humpf, H.-U.; Fürst, P.; Lahrssen-Wiederholt, M. e Wittkowski, R. J. Agric. Food Chem. 69, 7158, 2021.

³ Schmidt, M. E.; Pudenz, A.M.; Santos, M.J.; Calio, F.F.; Pereira, C.L.R.; Rocha, S.Y.; Denisov, E.; Damoc, E.; Makarov, A.; Eberlin, N.M. RSC Adv 8, 6183–6191, 2008.

⁴ Tose, L. V.; Cardoso, F. M. R.; Fleming, F. P.; Vicente, M. A.; Silva, S. R. C.; Aquije, G. M. F. V.; Vaz, B. G.; Romão, W. J. Braz. Chem. Soc. 30, 997, 2019.

⁵ Cho, Y.; Ahmed, A.; Islam, A.; Kim, S. Mass Spectrom. Rev. 34, 248, 2015.