



# Pesquisa multidisciplinar em separações (cromatografia, espectrometria de massas) e quimiometria



Amilton Oliveira, Andre Paiva, Carlos Teixeira, Julian Castiblanco, Juliana Crucello, Naiara Sampaio, Sofia Ferraz, Victor Cardoso, Leandro Hantao\*

\*E-mail: wang@unicamp.br

## CROMATOGRAFIA E ESPECTROMETRIA DE MASSAS

**Cromatografia Gasosa (GC)**

**Espectrometria de massas (MS)**

**Amostras de alta complexidade**

**GC×GC**

**GC**

**Espectrometria de Massas**

**Diferentes sistemas e diferentes possibilidades**

**QMS**

**HRMS**

**Quantificação**

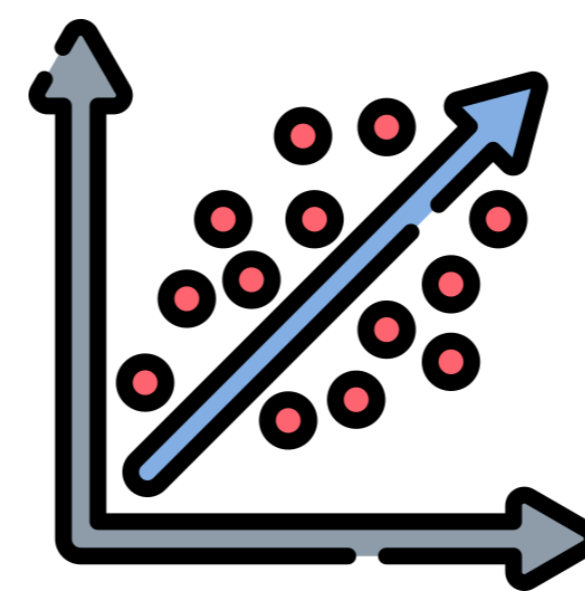
**Quantificação e Identificação**

**Ganho de resolução cromatográfica no sistema GC×GC.**

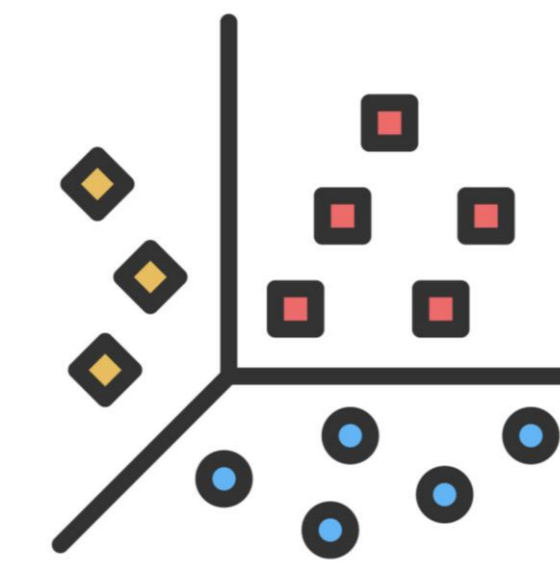
**Ganho de seletividade com o poder de resolução de massas**

## QUIMIOMETRIA

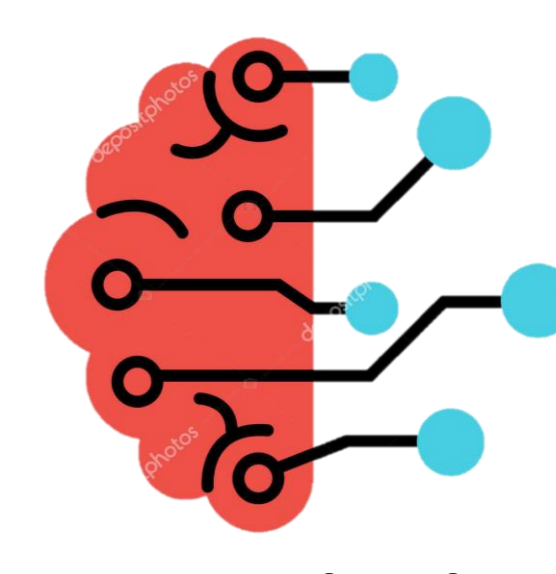
Com um grande volume de informações, ferramentas de ciência de dados e quimiometria são primordiais para o entendimento do sistema químico.



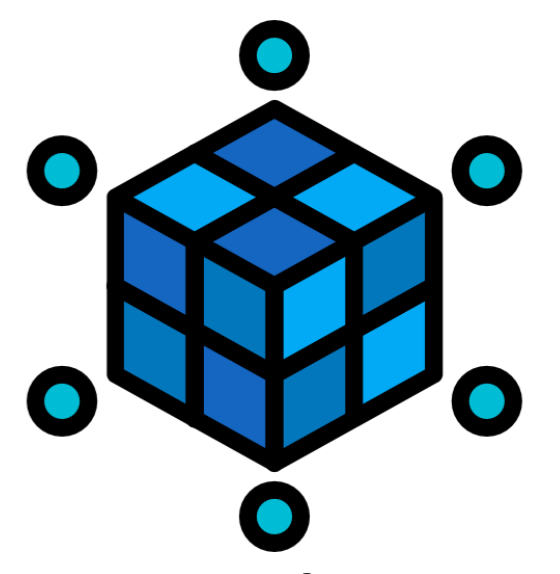
Quantificação



Classificação



Aprendizado de máquina

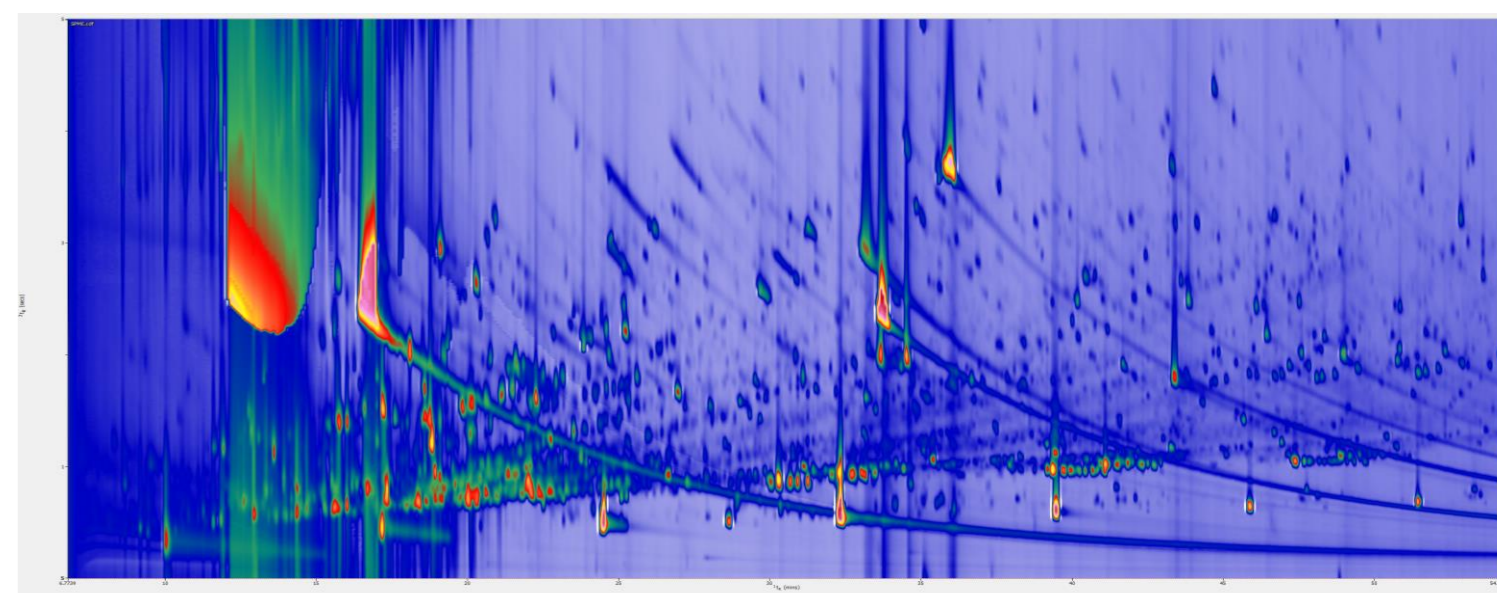


Dados multidimensionais

### Linhas de pesquisa do grupo LCGC

Nosso grupo estuda todos os aspectos fundamentais da cromatografia a gás multidimensional para resolução de desafios em áreas interdisciplinares como ciência dos alimentos, química ambiental com ênfase nos setores de energia, e mais recentemente o estudo de ar exalado (veja ao lado) no contexto da saúde e esporte. Para isso, trabalhamos com diversas técnicas e métodos de amostragem e preparo de amostras, incluindo pirólise (on-line), dessorção térmica, técnicas de microextração em fase sólida (SPME fiber e Arrow) e em fase líquida (HF-LPME), e estratégias exaustivas com fases sorventes imobilizadas como headspace dinâmico (ITEX) e extrações assistidas por vácuo (VASE).

Estudamos aplicações da quimiometria em dados cromatográficos e de espectrometria de massas para reconhecimento de padrões, resolução de curvas, classificações e regressões (lineares e não-lineares) para resolução de desafios como adulterações e derramamento de óleo.



**Amilton M. de Oliveira**  
E-mail: amilton.moliveira@gmail.com

Pesquisa direcionada à caracterização de petróleo e derivados. A cromatografia gasosa bidimensional abrangente (GC×GC) é explorada em conjunto com espectrometria de massas e diferentes sistemas de injeção.

Estudos recentes foram orientados a compostos pesados do petróleo, envolvendo sua análise direta em solos contaminados por derramamento. Ainda, parâmetros de aquisição em espectrômetro de massas híbrido (quadrupolo-Orbitrap) foram otimizados para o posterior tratamento quimiométrico dos dados de GC×GC-HRMS.

**Naiara M. F. M. Sampaio**  
E-mail: naiarams@unicamp.br

A minha pesquisa estuda os ácidos naftênicos presentes em amostras de efluente (água produzida) da indústria de óleo e gás, visando o desenvolvimento de métodos de determinação por GC×GC-MS e a avaliação da estabilidade de emulsões formadas na presença desses ácidos.

Recentemente, desenvolvemos um trabalho para facilitar e automatizar o tratamento dos dados gerados por GC×GC-MS e assim, realizar a análise composicional dos ácidos naftênicos presentes em amostras de água produzida.

**Julián E. B. Castiblanco**  
E-mail: j230017@dac.unicamp.br

Meu trabalho tem como objetivo propor estratégias de preparo de amostra e tratamento de dados multivariados que auxiliem na caracterização química de petróleo e derivados empregando técnicas cromatográficas.

Recentemente, elaboramos um modelo com 95% de acerto na classificação de amostras de água produzida de acordo com o teor de óleo e graxas e baseado na resolução CONAMA 393/2007.

DD-SIMCA

$\ln(t + \ln t_0)$

$< 29 \text{ mg L}^{-1}$     $> 29 \text{ mg L}^{-1}$

**Juliana Crucello**  
E-mail: crucialojuliana@gmail.com

Minha pesquisa tem como foco o desenvolvimento de novos métodos analíticos para aplicações em amostras complexas, em especial nas áreas de petroquímica e metabolômica. A principal plataforma analítica empregada é a GC×GC-MS e tenho como foco também a exploração de novas técnicas de preparo de amostra.

Nos últimos trabalhos desenvolvidos, demonstramos diferentes abordagens de preparo de amostra para a caracterização composicional de ácidos naftênicos em água produzida, incluindo métodos completamente automatizados.

**Andre C. Paiva**  
E-mail: cunhapai@gmail.com

Me interesse pelo desenvolvimento de novas tecnologias para a indústria de bebidas, mais especificamente as indústrias cervejeira e de café. Para tal, são exploradas técnicas de amostragem e separação cromatográfica em conjunto com abordagens quimiométricas.

**Saúde!** Em um trabalho publicado conseguimos utilizar metadados contendo avaliações de consumidores sobre cerveja para classificar amostras de acordo com a preferência do consumidor. Além disso, o protocolo aplicado possibilitou a identificação de compostos químicos relevantes para guiar esta preferência.

**Sofia M. M. Ferraz**  
E-mail: sofiammferraz@gmail.com

Uso da GC×GC-MS para a análise de fluidos de cigarro eletrônico. Análise do aerossol produzido pela vaporização térmica de fluidos de cigarro eletrônico usando a técnica de dessorção térmica na etapa de amostragem e preparo de amostras.

Com o auxílio de ferramentas quimiométricas buscaremos comparar o perfil químico antes e após a queima dos fluidos para cigarro eletrônico.

**Carlos A. Teixeira**  
E-mail: carlostx@unicamp.br

Pesquisa focada na implementação de soluções multivariadas (quimiometria/ aprendizado de máquina) para interpretação de dados de cromatografia gasosa bidimensional abrangente acoplada a espectrometria de massas de alta resolução (GC×GC-HRMS)

Em trabalhos recentes, conseguimos estimar propriedades físico-químicas de interesse em petróleo bruto e seus cortes de maneira rápida e simultânea.

**Victor G. K. Cardoso**  
E-mail: victor.cardoso@iqm.unicamp.br

O meu interesse é o desenvolvimento de novas tecnologias para a indústria de café usando técnicas modernas de espectrometria de massas e ferramentas avançadas de quimiometria e aprendizado de máquina.

Em trabalhos recentes, conseguimos estimar propriedades sensoriais do café, como acidez e amargor, com até 96% de acerto, levando apenas alguns segundos. Além disso, foi possível identificar compostos químicos que impactam diretamente o perfil sensorial.

### Nossas últimas publicações



Financiamento:

