

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

LÍLIAN CRISTINA CÔCCO

**PREVISÃO DE PROPRIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS E COMPOSIÇÃO QUÍMICA
DA GASOLINA A PARTIR DE ESPECTROS NO INFRAVERMELHO.**

CURITIBA

2008

LÍLIAN CRISTINA CÔCCO

**PREVISÃO DE PROPRIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS E COMPOSIÇÃO QUÍMICA
DA GASOLINA A PARTIR DE ESPECTROS NO INFRAVERMELHO.**

Tese apresentada como requisito parcial à obtenção de grau de Doutor. Área de concentração: Engenharia de Processos Térmicos e Químicos, Programa de Pós-Graduação em Engenharia - PIPE, Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Itsuo Yamamoto

CURITIBA

2008

Côcco, Lillian Cristina

Previsão de propriedades físico-químicas e composição química da gasolina a partir de espectros no infravermelho / Lillian Cristina Côcco.
- Curitiba, 2008.

244 f.: il.; tab.; graf.; 1 CD-ROM

Tese (doutorado) – Universidade Federal do Paraná. Setor de Tecnologia. Programa de Pós-Graduação em Engenharia - PIPE.
Orientador: Carlos Itsuo Yamamoto

1. Espectrometria de massa. 2. Gasolina. 3. Cromatografia de gás.
4. Modelagem de dados. I. Yamamoto, Carlos Itsuo. II. Título.

CDD 22 665.53827

Dedico este trabalho aos meus filhos Denis e Cristian e aos meus pais Vera e Reinaldo que sempre me apoiaram.

AGRADECIMENTOS

Agradeço:

A meu querido Deus, pelo dom da vida...

Aos meus filhos e familiares, que sempre me apoiaram durante as fases difíceis da vida e me alegraram nas fases boas...

Ao meu orientador Prof. Carlos Itsuo Yamamoto, pela confiança e pelo apoio...

Aos Professores participantes da banca de avaliação, Prof. Luiz Fernando de Lima Luz Junior, Prof.^a Ana Lúcia Ramalho Mercê, Prof. Célio L. Cavalcante Júnior, Prof. José Eduardo de Oliveira e Prof. Luiz Antônio D'Ávila, pelo interesse e pela contribuição valiosa para este estudo...

Ao Prof. Patrício Guillermo Peralta Zamora, que me acolheu no Departamento de Química e abriu as portas para novos conhecimentos...

Ao Departamento de Química da UFPR, representados por Prof.^a Ana Luisa Lacavo Lordelo, Prof.^a Iara Messerschmidt, Prof. Lauro Camargo Dias Júnior, Prof. Luis Pereira Ramos e Prof.^a Orliney Maciel Guimarães pelos valiosos ensinamentos na parte de química analítica...

Aos meus queridos amigos, em especial à Miriam Machado Cunico, Elaine Tiburtius, Nicole Marques Hoff, Rubia Carla Barato Plochanski e Thameny Grah de Almeida, pelo companheirismo e pela troca de experiências...

À equipe de pesquisa composta por doutorandos e mestrandos dos departamentos de Química, Engenharia Química, Farmácia, Odontologia, Engenharia Florestal, Engenharia Agrônômica, que desenvolveram trabalhos em conjunto, permitindo o aprimoramento das técnicas analíticas utilizadas...

À CAPES pelo fomento da bolsa de doutorado por um ano...

Ao projeto CTPETRO/FINEP pelo suporte financeiro para aquisição dos equipamentos envolvidos neste estudo...

Ao Laboratório de Análises de Combustíveis Automotivos pela infraestrutura oferecida e pelo incentivo ao desenvolvimento deste estudo...

Aos Técnicos Químicos Leandro Coriolano e Leandro Galletto, que muito me auxiliaram nos ensaios físico-químicos na gasolina proporcionando melhores condições para o desenvolvimento deste estudo...

À Química Eloize C. Vassão pelos relatórios de controle e pela paciência...

A todas as pessoas que contribuíram direta ou indiretamente para a realização deste estudo...

Muito Obrigada.

Caem as folhas de repente,
Brotam outras pelos ramos,
Murcham flores, surgem pomos.
E a planta volta à semente.
Assim somos, sutilmente,
Diferimos do que fomos.
Impossível transmitir,
Por secreto e singular,
O acrescentar e perder
Desse crescer que é mudar.

(“Evolução” – Helena Kolody)

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

FIGURA 01 – ESQUEMA DE TRABALHO DESENVOLVIDO NO PRESENTE ESTUDO.....	05
FIGURA 02 – ESQUEMA DE ESPECTRO ELETROMAGNÉTICO.....	09
FIGURA 03 – INTERAÇÃO DA RADIAÇÃO ELETRO MAGNÉTICA COM UMA AMOSTRA.....	10
FIGURA 04 – ESPECTRO ELETROMAGNÉTICO DAS REGIÕES DE ULTRAVIOLETA, VISÍVEL E INFRAVERMELHO.....	12
FIGURA 05 – MODOS VIBRACIONAIS PARA UM GRUPO CH ₂ . VIBRAÇÕES QUE GERAM DEFORMAÇÃO AXIAL.....	16
FIGURA 06 – MODOS VIBRACIONAIS PARA UM GRUPO CH ₂ . VIBRAÇÕES DE DEFORMAÇÃO ANGULAR.....	16
FIGURA 07 – DIVISÃO DAS REGIÕES PRINCIPAIS DE UM ESPECTRO NO INFRAVERMELHO MÉDIO.....	20
FIGURA 08 - ESPECTROS DE ISÔMEROS C ₈ H ₁₀ EM CICLOHEXANO.....	21
FIGURA 09 – ESQUEMA DE UMA TÍPICA CÉLULA DE ATR.....	22
FIGURA 10 – AMOSTRAGEM POR ATR: (A) CRISTAL PARA MEDIDA POR SIMPLES REFLEXÃO; (B) CRISTAL PARA MEDIDA POR MÚLTIPLA REFLEXÃO.....	22
FIGURA 11 – FOTO DE UMA COLUNA CAPILAR.....	23
FIGURA 12 – SEPARAÇÃO DE DOIS SOLUTOS EM UMA COLUNA CROMATOGRÁFICA.....	24
FIGURA 13 – ESQUEMA DE UM SISTEMA CROMATOGRÁFICO.....	24
FIGURA 14 – EXEMPLO DE CROMATOGRAMA E PARÂMETROS QUALITATIVOS E QUANTITATIVOS.....	25
FIGURA 15 – ESQUEMA DE DETECTOR FID.....	26
FIGURA 16 – IDENTIFICAÇÃO DE DESCONHECIDOS PELO TEMPO DE RETENÇÃO USANDO PADRÕES.....	27
FIGURA 17 – GRÁFICO COLORIDO DE UMA SEPARAÇÃO GC x GC DE UM SOLVENTE NÃO AROMÁTICO.....	32

FIGURA 18 – ESPECTRO DE MASSAS POR IONIZAÇÃO DE ELÉTRON DO ISOPRENO (2-METILBUTA-1,3-DIENO).....	36
FIGURA 19 – ÍON TRAP DESMONTADO.....	37
FIGURA 20 – SECÇÃO VERTICAL DE UM ION TRAP.....	37
FIGURA 21 – PRINCÍPIO DE IONIZAÇÃO DA TÉCNICA DE IMPACTO DE ELÉTRONS.....	38
FIGURA 22 – ESQUEMA DE SEPARAÇÃO DOS ÍONS POR RAZÃO MASSA/CARGA.....	39
FIGURA 23 – UM OUTRO PONTO DE VISTA DA ESPECTROMETRIA DE MASSAS.....	39
FIGURA 24– ESPECTRO IV DE (a) SOLUÇÃO DE ASPIRINA EM ÁGUA (1 m/v%) E (b) A MESMA SOLUÇÃO APÓS SUBTRAÇÃO DO ESPECTRO DA ÁGUA.....	51
FIGURA 25 – PRIMEIRA E SEGUNDA DERIVADA DE DOIS PICOS SOBREPOSTOS.....	52
FIGURA 26 – BANDA COMPLEXA DE ABSORÇÃO (a), E SUA CORRESPONDENTE PRIMEIRA (b) E SEGUNDA (c) DERIVADA.....	53
FIGURA 27 – O FILTRO SAVITSKY-GOLAY COM UMA JANELA DE $2m + 1 = 5$	54
FIGURA 28 – RESULTADOS DA SUAVIZAÇÃO OBTIDA PELO FILTRO SAVITSKY-GOLAY COM DIFERENTES TAMANHOS DE JANELA.....	55
FIGURA 29– PRINCÍPIO DO PCA.....	58
FIGURA 30 – GRÁFICO DE DOIS COMPONENTES PRINCIPAIS, COM OS EIXOS DAS VARIÁVEIS ORIGINAIS 1 E 2.....	60
FIGURA 31 – GRÁFICO DE SCORES COM DUAS COMPONENTES PRINCIPAIS DIFERENCIANDO DIESEL DO TIPO B E D.....	61
FIGURA 32 – GRÁFICO DE SCORES (A) E LOADINGS (B) PARA DUAS COMPONENTES PRINCIPAIS.....	62
FIGURA 33 – ESQUEMA DA REGRESSÃO DE COMPONENTES PRINCIPAIS.....	63
FIGURA 34 – PRINCÍPIOS DO PLS.....	65
FIGURA 35 – ERROS DE TREINAMENTO, VALIDAÇÃO CRUZADA E CONJUNTO DE TESTE.....	68

FIGURA 36 – CORRELAÇÃO ENTRE OS MÉTODOS IV E O EXPERIMENTAL (ASTM D86) PARA TODAS AS TEMPERATURAS DA CURVA DE DESTILAÇÃO.....	72
FIGURA 37 – VALORES PREVISTOS X REAIS DE PROPRIEDADES DO QUEROSENE. (A) PONTO DE FULGOR, (B) IBP, (C)T ₁₀ , (E) VISCOSIDADE E (F) % AROMÁTICOS.....	73
FIGURA 38 – VALORES PREVISTOS X REAIS DE PROPRIEDADES DO BETÚMEM.....	74
FIGURA 39 – VALORES PREVISTOS X REAIS DE TEORES DE OXIGENADOS ADICIONADOS À GASOLINA.	78
FIGURA 40– VALORES PREVISTOS X REAIS DE TEORES DE ADULTERANTES ADICIONADOS À GASOLINA.....	79
FIGURA 41 – GS 1000 DA PETROSPECT.....	86
FIGURA 42 – IROX 2000 DA GRABNER.....	86
FIGURA 43 – ESPECTRÔMETRO MID/NIR EXCALIBUR	88
FIGURA 44 – CROMATÓGRAFO CG – FID DA VARIAN INC.....	88
FIGURA 45 – CP 3800 ACOPLADO A UM DETECTOR DE MASSAS SATURN 2000 DA VARIAN INC.....	89
FIGURA 46 – DENSÍMETRO DIGITAL DMA 4500 DA ANTOON PAAR	92
FIGURA 47 – APARELHO MEDIDOR DE PRESSÃO DE VAPOR MINIVAP VPS DA GRABNER INSTRUMENTS.....	93
FIGURA 48 – DESTILADORES AUTOMÁTICOS HDA 627 E 628 DA HERZOG.....	94
FIGURA 49 – ESPECTRO DE INFRAVERMELHO DO XILENO COMERCIAL EM CÉLULA DE CaF.....	96
FIGURA 50 – ESPECTRO DE INFRAVERMELHO DO XILENO COMERCIAL EM CÉLULA DE NaCl COM NUJOL.....	97
FIGURA 51 – ESPECTRO DE IV COMPARATIVO DE XILENOS EM CÉLULA ZnSE POR ATR.....	98
FIGURA 52 – INTERPRETAÇÃO DO ESPECTRO NO INFRAVERMELHO MÉDIO DE GASOLINA AUTOMOTIVA.....	99

FIGURA 53 – RELATÓRIO GERADO PELO PROGRAMA DHA DE UMA GASOLINA COMUM QUE ESTÁ DENTRO DAS ESPECIFICAÇÕES DA ANP.....	102
FIGURA 54 – RELATÓRIO GERADO PELO PROGRAMA DHA DE OUTRA GASOLINA QUE ESTÁ DENTRO DAS ESPECIFICAÇÕES DA ANP.....	104
FIGURA 55 - IONIZAÇÃO QUÍMICA COM ACETONITRILA E (E)-HEX-3-ENO.....	105
FIGURA 56 - IONIZAÇÃO QUÍMICA COM METANOL E (E)-HEX-3-ENO.....	106
FIGURA 57 - IONIZAÇÃO QUÍMICA COM ACETONITRILA E NAFTALENO	107
FIGURA 58 - IONIZAÇÃO QUÍMICA COM METANOL E NAFTALENO.....	107
FIGURA 59 - 3-METILBUTILBENZENO.....	108
FIGURA 60 - IONIZAÇÃO QUÍMICA COM ACETONITRILA E 3-METILBUTILBENZENO.....	108
FIGURA 61 - IONIZAÇÃO QUÍMICA COM METANOL E HEX-1-ENO.....	109
FIGURA 62 - IONIZAÇÃO QUÍMICA COM ACETONITRILA E HEXANO	111
FIGURA 63- IONIZAÇÃO QUÍMICA COM METANOL E HEXANO	111
FIGURA 64 - IONIZAÇÃO QUÍMICA COM ACETONITRILA E ISOPENTANO.....	112
FIGURA 65 - IONIZAÇÃO QUÍMICA COM METANOL E ISOPENTANO.....	113
FIGURA 66 - IONIZAÇÃO QUÍMICA COM ACETONITRILA E CICLOHEXANO.....	114
FIGURA 67 - IONIZAÇÃO QUÍMICA COM METANOL E CICLOHEXANO.....	114
FIGURA 68 – IONIZAÇÃO QUÍMICA DO ETANOL COM ACETONITRILA.....	115
FIGURA 69 – IONIZAÇÃO QUÍMICA DO ETANOL COM METANOL.....	116

FIGURA 70 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO (E)-PENT-2-ENO.....	117
FIGURA 71 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO (Z)-PENT-2-ENO.....	118
FIGURA 72 – ESPECTRO DE MASSAS DO COMPOSTO 2,4-DIMETILEPTANO APRESENTADO PELA BIBLIOTECA NIST.....	119
FIGURA 73 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO 2,4-DIMETILEPTANO OBTIDO EXPERIMENTALMENTE.....	119
FIGURA 74 – ESPECTRO DE MASSAS DO COMPOSTO TIOFENO APRESENTADO PELA BIBLIOTECA NIST.....	120
FIGURA 75 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO TIOFENO OBTIDO EXPERIMENTALMENTE.....	120
FIGURA 76 – ESPECTRO DE MASSAS DO COMPOSTO 1,1-DIETOXIETANO APRESENTADO PELA BIBLIOTECA NIST.....	121
FIGURA 77 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO TIOFENO OBTIDO EXPERIMENTALMENTE.....	121
FIGURA 78 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO DECANO OBTIDO EXPERIMENTALMENTE.....	122
FIGURA 79 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO UNDECANO OBTIDO EXPERIMENTALMENTE.....	123
FIGURA 80 – ESPECTROGRAMA DE UM COMPOSTO DESCONHECIDO IDENTIFICADO COMO ISOPARAFÍNICO COM 10 CARBONOS.....	124
FIGURA 81 – ESQUEMA DE FRAGMENTAÇÃO PELO IMPACTO DE ELÉTRONS DA MOLÉCULA DO 2,2-DIMETILEPTANO.....	125
FIGURA 82 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO 2,2-DIMETILEPTANO.....	126
FIGURA 83 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO 1,1,3-TRIMETILCICLOEXANO.....	127
FIGURA 84 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO CICLOEXANO.....	129
FIGURA 85 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO 1,1DIETILCICLOPROPANO.....	130

FIGURA 86 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO 3-METILEX-2-ENO.....	130
FIGURA 87 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO 3-METIL-BUT-1-ENO.....	131
FIGURA 88 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO 1-PENT-1-ENO.....	131
FIGURA 89 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO (Z)-PENTA-1,3-DIENO.....	132
FIGURA 90 – ESQUEMA DE FRAGMENTAÇÃO PELO IMPACTO DE ELÉTRONS DA MOLÉCULA DO 2-METILPENT-2-ENO.....	133
FIGURA 91 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO 2-METILPENT-2-ENO.....	133
FIGURA 92 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO BUTILBENZENO.....	134
FIGURA 93 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO 2-METILNAFTALENO.....	135
FIGURA 94 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO 3-METILBUTILBENZENO.....	137
FIGURA 95 – ESPECTROGRAMA DE UM COMPOSTO AROMÁTICO DESCONHECIDO.....	139
FIGURA 96 – IONIZAÇÃO QUÍMICA COM ACETONITRILA DE UM COMPOSTO AROMÁTICO SUSPEITO DE COELUIR COM OUTRO.....	140
FIGURA 97 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO 1,3,5-TRIMETILBENZENO.....	141
FIGURA 98 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO ETANOL.....	142
FIGURA 99 – ESQUEMA DE FRAGMENTAÇÃO PELO IMPACTO DE ELÉTRONS DA MOLÉCULA DO ETANOL.....	143
FIGURA 100 – CROMATOGRAMA DE GASOLINA COMUM COM IDENTIFICAÇÃO POR DHA CONFIRMADA POR ESPECTROMETRIA DE MASSAS E IONIZAÇÃO QUÍMICA.....	144
FIGURA 101 – ESPECTRO INFRAVERMELHO DE 128 AMOSTRAS DE GASOLINA.....	145

FIGURA 102 – ESPECTRO INFRAVERMELHO DE 128 AMOSTRAS DE GASOLINA APÓS AUTOESCALONAMENTO.....	146
FIGURA 103 – ANÁLISE PCA DAS 128 AMOSTRAS DE GASOLINA EXTRAÍDO DO PROGRAMA PLS TOOLBOX DO MATLAB™ 7.4.0 (R2007a).....	147
FIGURA 104 – GRÁFICO DOS COMPONENTES PRINCIPAIS OBTIDOS A PARTIR DE ANÁLISE PCA DA MATRIZ DE ESPECTROS DE IV DE 128 AMOSTRAS DE GASOLINA.....	148
FIGURA 105 – GRÁFICO DE DUAS COMPONENTES PRINCIPAIS (PC1/PC2) DE 128 AMOSTRAS DE GASOLINA.....	149
FIGURA 106 – GRÁFICO DE DUAS COMPONENTES PRINCIPAIS (PC1/PC3) DE 128 AMOSTRAS DE GASOLINA.....	149
FIGURA 107 – GRÁFICO DOS VALORES PREVISTOS X EXPERIMENTAIS DO TEOR DE PARAFÍNICOS.....	155
FIGURA 108 – GRÁFICO DOS VALORES PREVISTOS X EXPERIMENTAIS DO TEOR DE AROMÁTICOS.....	155
FIGURA 109 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PLS PARA MASSA ESPECÍFICA.....	159
FIGURA 110 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PCR PARA MASSA ESPECÍFICA.....	159
FIGURA 111 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PLS PARA PRESSÃO DE VAPOR REID.....	162
FIGURA 112 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PCR PARA PRESSÃO DE VAPOR REID.....	162
FIGURA 113 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PLS PARA T10 DA CURVA DE DESTILAÇÃO.....	164
FIGURA 114 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PCR PARA T10 DA CURVA DE DESTILAÇÃO.....	165
FIGURA 115 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PLS PARA T50 DA CURVA DE DESTILAÇÃO.....	167
FIGURA 116 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PCR PARA T50 DA CURVA DE DESTILAÇÃO.....	167
FIGURA 117 – ASPECTO VISUAL DE AMOSTRA DE GASOLINA E RESÍDUOS DE DESTILAÇÃO DE 50, 70, 80 E 90%.....	169

FIGURA 118 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PLS PARA T90 DA CURVA DE DESTILAÇÃO.....	171
FIGURA 119 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PCR PARA T90 DA CURVA DE DESTILAÇÃO.....	171
FIGURA 120 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PLS PARA PFE DA CURVA DE DESTILAÇÃO.....	173
FIGURA 121 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PCR PARA PFE DA CURVA DE DESTILAÇÃO.....	174
FIGURA 122 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PLS PARA TEOR DE AROMÁTICOS.....	176
FIGURA 123 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PCR PARA TEOR DE AROMÁTICOS.....	176
FIGURA 124 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PLS PARA TEOR DE PARAFÍNICOS.....	178
FIGURA 125 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PCR PARA TEOR DE PARAFÍNICOS.....	179
FIGURA 126 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PLS PARA TEOR DE ISOPARAFÍNICOS.....	181
FIGURA 127 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PCR PARA TEOR DE ISOPARAFÍNICOS.....	181
FIGURA 128 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PLS PARA TEOR DE NAFTÊNICOS.....	183
FIGURA 129 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PCR PARA TEOR DE NAFTÊNICOS.....	184
FIGURA 130 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PLS PARA TEOR DE OLEFÍNICOS.....	186
FIGURA 131 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PCR PARA TEOR DE OLEFÍNICOS.....	187
FIGURA 132 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PLS PARA TEOR DE OXIGENADOS.....	189
FIGURA 133 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PCR PARA TEOR DE OXIGENADOS.....	189

LISTA DE TABELAS

TABELA 01 – DIVISÕES DA REGIÃO DO INFRAVERMELHO.....	14
TABELA 02 - FREQUÊNCIAS DE GRUPO DE ALGUNS GRUPOS ORGÂNICOS.....	18
TABELA 03 – RESPOSTA AO DETECTOR FID DE DIVERSOS TIPOS DE COMPOSTOS.....	26
TABELA 04 – SUBSTÂNCIAS COMUMENTE UTILIZADAS EM IONIZAÇÃO QUÍMICA.....	41
TABELA 05 – TRABALHOS DESENVOLVIDOS EM DIFERENTES DERIVADOS DE PETRÓLEO APLICANDO-SE CALIBRAÇÃO MULTIVARIADA.....	75
TABELA 06 – TRABALHOS DESENVOLVIDOS APLICANDO-SE CALIBRAÇÃO MULTIVARIADA EM GASOLINA.....	80
TABELA 07 – RESUMO DAS ATRIBUIÇÕES DE BANDAS NO IV PARA A GASOLINA.....	101
TABELA 08- INTERPRETAÇÃO DOS FRAGMENTOS DO COMPOSTO DECANO.....	122
TABELA 09 - INTERPRETAÇÃO DE FRAGMENTOS DE UM COMPOSTO DESCONHECIDO.....	125
TABELA 10 - INTERPRETAÇÃO DOS FRAGMENTOS DO COMPOSTO 2,2-DIMETILEPTANO.....	126
TABELA 11 - INTERPRETAÇÃO DOS FRAGMENTOS DO COMPOSTO 1,1,3-TRIMETIL-CICLOEXANO.....	128
TABELA 12 - INTERPRETAÇÃO DOS FRAGMENTOS DO COMPOSTO CICLOEXANO.....	129
TABELA 13 - INTERPRETAÇÃO DOS FRAGMENTOS DO COMPOSTO 2-METILPENT-2-ENO.....	133
TABELA 14 - INTERPRETAÇÃO DOS FRAGMENTOS DO COMPOSTO 2-METILNAFTÁLENO.....	135
TABELA 15 - INTERPRETAÇÃO DOS FRAGMENTOS DO COMPOSTO 3-METILBUTILBENZENO.....	138
TABELA 16 - INTERPRETAÇÃO DOS FRAGMENTOS DE UM AROMÁTICO DESCONHECIDO.....	139

TABELA 17 - INTERPRETAÇÃO DOS FRAGMENTOS DO COMPOSTO 1,3,5-TRIMETILBENZENO	141
TABELA 18 - INTERPRETAÇÃO DOS FRAGMENTOS DO COMPOSTO ETANOL	143
TABELA 19 – DESVIOS EXPERIMENTAIS DE EQUIPAMENTOS UTILIZADOS NO ESTUDO	151
TABELA 20 – FAIXA DE VARIAÇÃO DAS PROPRIEDADES DAS AMOSTRAS DE GASOLINA COLETADAS.....	153
TABELA 21 - DADOS DO CONJUNTO DE TESTE PARA A MASSA ESPECÍFICA E MODELOS PLS E PCR.	158
TABELA 22 - DADOS DO CONJUNTO DE TESTE PARA A PV REID E MODELO PLS E PCR.	161
TABELA 23 - DADOS DO CONJUNTO DE TESTE PARA T ₁₀ E MODELOS PLS E PCR.	163
TABELA 24 - DADOS DO CONJUNTO DE TESTE PARA T ₅₀ E MODELOS PLS E PCR.	166
TABELA 25 - DADOS DO CONJUNTO DE TESTE PARA T ₉₀ E MODELOS PLS E PCR.	169
TABELA 26 - DADOS DO CONJUNTO DE TESTE PARA PFE E MODELOS PLS E PCR.	172
TABELA 27 - DADOS DO CONJUNTO DE TESTE PARA % AROMÁTICOS E MODELOS PLS E PCR.	175
TABELA 28 - DADOS DO CONJUNTO DE TESTE PARA % PARAFÍNICOS E MODELOS PLS E PCR.....	177
TABELA 29 - DADOS DO CONJUNTO DE TESTE PARA % ISOPARAFÍNICOS E MODELOS PLS E PCR.	180
TABELA 30 - DADOS DO CONJUNTO DE TESTE PARA % NAFTÊNICOS E MODELOS PLS E PCR.	182
TABELA 31 - DADOS DO CONJUNTO DE TESTE PARA % OLEFÍNICOS E MODELOS PLS E PCR.	185
TABELA 32 - DADOS DO CONJUNTO DE TESTE PARA % OXIGENADOS E MODELOS PLS E PCR.	188
TABELA 33 – RESUMO DOS PARÂMETROS DE TODOS OS MODELOS OBTIDOS NESTE ESTUDO.....	193

TABELA 34 – RESUMO DOS DESVIOS DO CONJUNTO DE TESTE.....	194
TABELA 35 – COMPARAÇÃO DESTE TRABALHO COM OUTRAS DISSERTAÇÕES E TESES.....	195

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

- ANP** – Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis.
- ASTM** – American standard for testing material.
- ATR** – Attenuated total reflectance.
- CG** – Cromatografia a gás.
- CFR** – Cooperative fuel research.
- CLS** – Classical least square.
- CP** – Componente principal.
- DHA** – Detailed hydrocarbon analysis.
- EI** – Electron impact.
- FCC** - Fluid Catalytic Cracking
- FID** – Flame ionization detector.
- FTIR** – Fourier transform infrared.
- GC** – Gas chromatography.
- HPLC** – High pressure liquid chromatography.
- IV** – Infravermelho.
- LACAUT_{ets}** – Laboratório de Análises de Combustíveis Automotivos.
- MIR / MID** – middle infrared.
- MLR** – Multiple linear regression.
- MON** – Motor octane number.
- MTBE** – Metil terc butil éter.
- MS** – Mass spectrometry.
- NIPALS** – nonlinear iterative partial least square.
- NIR** – near infrared.
- NBR** – Norma brasileira.
- OSC** – orthogonal signal correction.
- PBM** – Probability Based Matching
- PCA** – Principal component analysis.
- PCR** – Principal component regression.
- PIANO** – Parafínicos, isoparafínicos, aromáticos, naftênicos e olefínicos.
- PFE** – Ponto final de ebulição.

PLS – Partial least square.

PLSR – Partial least squares regression.

PM – Peso molecular.

PMQC – Programa de monitoramento de qualidade de combustíveis.

PV REID – Pressão de vapor Reid.

RF – Rádio frequência.

RLM – Regressão linear múltipla.

RMN – Ressonância magnética nuclear.

RMSEC – Root mean square error calibration.

RMSECV – Root mean square error cross-validation.

RMSEP – Root mean square error prediction.

RMSEV – Root mean square error validation.

RNA – Rede neural artificial.

RON – Research octane number.

T₁₀ – Temperatura na qual 10 % em volume de combustível foi destilado.

T₅₀ – Temperatura na qual 50 % em volume de combustível foi destilado.

T₉₀ – Temperatura na qual 90 % em volume de combustível foi destilado.

UV/VIS – Ultravioleta/visível.

LISTA DE SÍMBOLOS

a – constante de proporcionalidade (absortividade).

A – absorbância.

b – caminho ótico (espectroscopia) ou coeficientes de regressão (modelagem).

b_o – um *offset*, ou valor de base, referência.

c – concentração.

f ou **c** – residual.

I_A – Intensidade de luz absorvida.

I_o – Intensidade de luz inicial.

I_R – Intensidade de luz refletida.

I_S – Intensidade de luz espalhada.

I_T – Intensidade de luz transmitida.

m/z – razão massa/carga.

P_o – Potência do feixe de luz inicial.

P – Potência do feixe de luz final (espectroscopia) ou matriz de *loadings* (modelagem).

T – Transmitância (espectroscopia) ou matriz de *scores* (modelagem).

x – vetor de variáveis preditoras.

X – matriz de dados de entrada.

y – vetor de variáveis de resposta.

Y – matriz de dados de resposta.

μm – micrômetro, unidade de comprimento de onda.

δ - deformação angular simétrica no plano.

ω - deformação angular simétrica fora do plano.

ρ - deformação angular assimétrica no plano.

τ - deformação angular assimétrica fora do plano.

v_{as} – deformação axial assimétrica.

v_s - deformação axial simétrica.

RESUMO

Avaliar a qualidade de um combustível é uma tarefa muito importante, pois pode-se controlar especificações técnicas de produção, bem como parâmetros ambientais, ambos os quais devem ser obedecidos para um bom funcionamento do motor e menor emissão de gases tóxicos de combustão. Para a gasolina, este controle é realizado através de ensaios de normas ASTM e NBR específicos, adotados pela Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis. Ferramentas úteis na avaliação da qualidade, modelos matemáticos vêm sendo aplicados com a principal finalidade de prever propriedades físico-químicas da gasolina e sua composição química média. Estes modelos matemáticos podem ser obtidos a partir da espectroscopia no infravermelho e calibração multivariada, cujas principais vantagens são rapidez analítica e boa capacidade preditiva. Deve-se considerar que este tipo de análise, não substitui os ensaios em laboratório, pois os mesmos são as referências para diferenciar amostras conformes e não conformes, porém auxiliam de modo considerável uma avaliação primária da qualidade da gasolina devido à rápida resposta analítica. Este trabalho descreve a obtenção de modelos matemáticos, aplicando-se calibração multivariada em espectros no infravermelho médio obtidos por ATR, de 128 amostras de gasolina, com variada composição química, coletadas em um período de dois anos e meio. Os espectros IV foram utilizados na montagem da matriz de entrada para a modelagem, enquanto os ensaios físico-químicos padronizados e cromatografia gasosa forneceram dados para as matrizes de saída. Noventa amostras foram utilizadas para treinamento e 38 para teste. Para calibrar a composição química obtida pela cromatografia, utilizou-se as técnicas de espectrometria de massas e ionização química, para identificar compostos desconhecidos presentes na gasolina e melhorar o ajuste aos modelos matemáticos. Foram detectados e identificados 290 compostos, sendo 101 desconhecidos, seguindo regras de fragmentação para cada grupo químico presente na gasolina. Assim sendo, 6 modelos PLS/PCR foram obtidos para previsão de propriedades como massa específica, pressão de vapor Reid, T_{10} , T_{50} , T_{90} e PFE da curva de destilação. Outros 6 modelos PLS/PCR foram obtidos para previsão dos grupos químicos presentes (teor de aromáticos, parafínicos, isoparafínicos, naftênicos, olefínicos e oxigenados). De um modo geral obteve-se modelos matemáticos com bons ajustes de treinamento, com coeficientes de correlação maiores que 0,975 (T_{10}) atingindo um máximo de 0,998 (teor de naftênicos) e são capazes de prever a composição química média e propriedades de interesse da gasolina, com desvios aceitáveis de previsão. Os modelos PLS tiveram os melhores resultados e poderão ser utilizados para montagem de um equipamento portátil ou um sensor virtual para aplicação em campo, avaliando-se a qualidade de maneira rápida e eficaz.

Palavras chave: calibração multivariada, infravermelho médio, espectrometria de massas, ionização química, cromatografia gasosa, gasolina, PLS, PCR.

ABSTRACT

It is very important to evaluate the fuel quality because it is possible to control technical specifications of production, as well as environmental parameters, both which must be obeyed for a good engine performance and lower emission of toxic gases from combustion. For gasoline this control is carried out through specific ASTM and NBR assays, adopted by the Brazilian National Petroleum Agency. Useful tools for evaluating the quality, mathematical models have been applied with the main purpose of predicting physico-chemical properties of gasoline and its average chemical composition. These mathematical models can be attained from infrared spectroscopy and multivariate calibration, which main advantages are fast analytical response and good prediction capability. It must be considered that this type of infrared analysis does not substitute the assays in laboratory, therefore they are the references to differentiate the suitable from the unsuitable samples. On the other hand it assists in a considerable way the primary evaluation of the gasoline quality due to fast analytical response. This work describes the attainment of mathematical models, applying multivariate calibration in middle infrared spectrum with ATR, from 128 gasoline samples with diverse chemical compositions, collected in a period of two and a half years. Infrared spectra had been used to assemble the input matrix for the modeling, whereas the standardized assays and gaseous chromatography had supplied the output matrices. Ninety samples were been used for training and 38 for testing. In order to calibrate chemical composition from chromatography, the techniques of mass spectrometry and chemical ionization were used to identify unknown substances of the gasoline studied and improve the fitting of the mathematical models. Two hundred and ninety substances were detected and identified, from which 101 were unknown, according to fragment rules for each chemical group in the gasoline. So, six PLS/PCR models were attained to predict some properties as specific mass, Reid vapor pressure, T_{10} , T_{50} , T_{90} and PFE from distillation curve. Another six PLS/PCR models were attained to predict the chemical groups composition of aromatics, paraffins, isoparaffins, naphthenes, olefins and oxygenates. In a general way, mathematical models were attained with good training fit, with correlation coefficients higher than 0,975 (T_{10}) and reaching a maximum of 0.998 (naphthenes) and they are able to forecast an average chemical percentage and properties of interest from gasoline, with acceptable prediction errors. PLS models had the best results and can be used to assemble a portable equipment or a virtual sensor for field applications, evaluating quality in a fast and efficient way.

Key words: multivariate calibration, middle infrared, mass spectrometry, chemical ionization, gas chromatography, gasoline, PLS and PCR.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Importância de Correlações Matemáticas para Avaliação da Qualidade de Combustíveis	1
1.2	Objetivo	3
1.3	Tópicos Principais	4
2	FUNDAMENTOS DE ESPECTROSCOPIA	7
2.1	Espectroscopia e Espectrometria	7
2.2	Radiação Eletromagnética	8
2.3	Absorção da Radiação	10
2.3.1	Transmitância e absorbância	11
2.3.2	Lei de Lambert-Beer	12
2.3.3	Espectros Típicos	13
2.4	Espectroscopia de Absorção no Infravermelho	14
2.4.1	Interpretação dos Espectros de Infravermelho	17
2.4.2	Técnica de Refletância Total Atenuada	21
3	FUNDAMENTOS DE CROMATOGRAFIA A GÁS E ESPECTROMETRIA DE MASSAS	23
3.1	Cromatografia a gás	23
3.1.1	Introdução	23
3.1.2	Métodos qualitativos	27
3.1.3	Métodos quantitativos	29
3.1.4	Cromatografia aplicada à indústria do petróleo	30
3.1.5	Composição Química da Gasolina Brasileira	33
3.1.6	Análise PIANO: método clássico de análise composicional	34
3.1.7	Programa DHA: Detailed Hydrocarbon Analysis	34
3.2	Espectrometria de Massas	36
3.2.1	Impacto de Elétrons	37
3.2.2	Ionização Química	40
3.2.3	Interpretação do Espectro de Massa	41
4	CALIBRAÇÃO MULTIVARIADA	46
4.1	Quimiometria	46
4.2	Calibração Multivariada Linear	47

4.3	Pré-tratamento de dados espectrais.....	50
4.3.1	Subtração de espectros.....	50
4.3.2	Autoescalamento.....	51
4.3.3	Derivatização.....	52
4.3.4	Suavização (smoothing).....	53
4.3.5	Correção ortogonal de sinal	56
4.4	Regressão Linear Múltipla.....	57
4.5	Análise de Componente Principal.....	58
4.6	Regressão do Componente Principal.....	63
4.7	Regressão dos Mínimos Quadrados Parciais.....	64
4.8	Validação Cruzada.....	66
4.9	Pós Modelagem	67
4.9.1	Verificação de amostras anômalas	69
4.10	Calibração Multivariada Aplicada à Indústria do Petróleo.....	71
4.11	Outros Estudos em Combustíveis Automotivos Desenvolvidos no Brasil.....	82
5	MATERIAL E MÉTODOS.....	86
5.1	Amostras.....	86
5.2	Infravermelho.....	87
5.3	CG-FID	88
5.4	CG-MS	89
5.5	Programa para Calibração Multivariada	91
5.6	Ensaio ASTM E NBR	92
5.6.1	Massa Específica a 20°C – Método do Densímetro Automático	92
5.6.2	Pressão de Vapor Reid – Método Mini.....	93
5.6.3	Curva de Destilação – Método da Destilação Atmosférica.....	94
6	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	96
6.1	Infravermelho.....	96
6.1.1	Avaliação do sinal analítico	96
6.1.2	Atribuições de bandas no IV.....	98
6.2	Técnicas Instrumentais Analíticas para Identificação Detalhada de Compostos Presentes na Gasolina.....	102
6.2.1	Ionização Química.....	104

6.2.2	Identificação dos Grupos Químicos por Espectros de Impacto de Elétrons	117
6.2.2.1	Grupo químico 1: parafínicos	121
6.2.2.2	Grupo químico 2: isoparafínicos	123
6.2.2.3	Grupo químico 3: naftênicos	127
6.2.2.4	Grupo químico 4: olefínicos	131
6.2.2.5	Grupo químico 5: aromáticos	134
6.2.2.6	Grupo químico 6: álcoois	142
6.3	Modelagem Matemática.....	145
6.3.1	Pré-tratamento	145
6.3.2	Regressão Linear Múltipla	154
6.3.3	PLS e PCR.....	156
6.3.3.1	Massa específica	157
6.3.3.2	Pressão de vapor REID.....	160
6.3.3.3	Curva de destilação: T ₁₀	163
6.3.3.4	Curva de destilação: T ₅₀	165
6.3.3.5	Curva de destilação: T ₉₀	168
6.3.3.6	Curva de destilação: PFE	172
6.3.3.7	% de Aromáticos	174
6.3.3.8	% Parafínicos	177
6.3.3.9	% Isoparafínicos.....	179
6.3.3.10	% Naftênicos	182
6.3.3.11	% Olefínicos	185
6.3.3.12	% Oxigenados	187
7	CONCLUSÕES	198
8	SUGESTÕES PARA FUTUROS TRABALHOS	201
	REFERÊNCIAS.....	202
	DOCUMENTOS CONSULTADOS.....	211
	APÊNDICES.....	212

1 INTRODUÇÃO

1.1 Importância de Correlações Matemáticas para Avaliação da Qualidade de Combustíveis

Propriedades físico-químicas de combustíveis, em particular da gasolina, são importantes referências de sua qualidade, devendo ser monitoradas a fim de mantê-la, respeitando-se leis ambientais e parâmetros técnicos. Cada propriedade é, em geral, uma complicada função da composição química da gasolina, que depende de características físico-químicas da matéria-prima (petróleo), bem como das misturas de correntes de diferentes processos de uma refinaria. Por isso, é usual a utilização de correlações matemáticas que forneçam informações relevantes aos profissionais da área de combustíveis automotivos.

Estas correlações matemáticas são utilizadas por equipamentos como o espectrômetro de infravermelho portátil para a previsão de propriedades físico-químicas de combustíveis a partir da análise do espectro obtido, reduzindo o custo de implantação de alguns ensaios em laboratórios para controle da qualidade de combustíveis e redução do tempo de obtenção de propriedades desejadas, tais como curva de destilação, densidade, pressão de vapor *Reid* e outras. São aplicadas principalmente para previsão de MON (*Motor Octane Number*) e RON (*Research Octane Number*), que são propriedades ligadas à qualidade antidetonante da gasolina. Os ensaios experimentais de MON e RON são demorados e de difícil execução, além de possuírem alto investimento. Com a utilização destes equipamentos portáteis, pode-se avaliar a qualidade da gasolina longe do laboratório.

Outras propriedades também são previstas através de correlações, tais como densidade, pressão de vapor *Reid* e curva de destilação. A própria composição química também é prevista por correlações, porém as previsões obtidas com as correlações existentes fornecem resultados que dependem muito de calibração e mesmo assim podem apresentar erros de previsão. Algumas correlações internas não estão preparadas para a gasolina nacional, que recebe uma quantidade apreciável de álcool etílico anidro, alterando significativamente a

composição química e conseqüentemente suas propriedades. Para corrigir estes desvios de previsão, a Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis, ANP, implantou um programa de calibração dos analisadores infravermelhos portáteis que realizam o monitoramento, na qual modifica-se o banco de dados destes equipamentos adicionando-se amostras de gasolina com composição química e propriedades conhecidas, melhorando sua resposta. Ainda assim, pode-se melhorar cada vez mais os desvios de previsão, ao aumentar a abrangência populacional, avaliar outros métodos matemáticos, espectrométricos e configurar novos equipamentos portáteis.

Para a montagem das correlações, utilizam-se dados gerados por qualquer técnica analítica de identificação, tais como espectrometria por infravermelho, ultravioleta ou de massas, espectrometria de ressonância magnética nuclear de hidrogênio (RMN ^1H) ou de carbono 13 (RMN ^{13}C) e cromatografia gasosa ou líquida, como dados de entrada. Os ensaios padrão, como densidade a 20°C e curva de destilação da gasolina, fornecem os dados de saída para posterior aplicação em um método de regressão de dados. O método matemático deve ser capaz de encontrar a relação existente entre as entradas e saídas, obtendo-se desta forma as correlações desejadas. Em resumo, para o desenvolvimento deste tipo de trabalho existe a necessidade da escolha de um método analítico confiável e um tipo de regressão de dados.

Em um trabalho realizado anteriormente (CÔCCO, 2003), aplicou-se a ferramenta matemática para regressão de dados não lineares denominada redes neurais artificiais (RNAs), a partir de resultados de cromatografia gasosa. Os desvios obtidos ficaram em média próximos de 1%. Os resultados alcançados estão próximos das faixas de incerteza de medição dos ensaios físico-químicos e comprovam que a ferramenta utilizada consegue correlacionar adequadamente a composição química e as propriedades físico-químicas estudadas. Entretanto, o tempo de análise por cromatografia gasosa é longo (140 minutos), tornando-o de certo modo inviável para aplicação em campo.

Para reduzir o tempo de análise na identificação detalhada da gasolina, pode-se alterar as condições de trabalho na cromatografia gasosa, alterando conseqüentemente o tempo da corrida cromatográfica. Porém perde-se importantes informações ao modificar a resolução (separação) dos picos cromatográficos. Devido a este problema, opta-se então por outro tipo de identificação composicional. Uma

grande variedade de técnicas instrumentais é utilizada na análise de hidrocarbonetos, tais como a cromatografia acoplada a um detector de massas (GC – EM) e cromatografia líquida (HPLC), porém ambas são análises demoradas tal qual a cromatografia gasosa. Pode-se aplicar espectrometria no infravermelho próximo (NIR), pois é uma técnica particularmente popular em aplicações industriais devido a sua rapidez de análise, cujo ensaio não destrutivo necessita de um mínimo de preparação de amostras (MACHO; LARRECHI, 2002).

Na análise de dados multivariados, como os obtidos por espectrometria no infravermelho, existe uma grande dificuldade de identificação do espectro da gasolina. Trabalhos apresentados por GALLIGNANI *et al.* (1993a,1994b) identificaram apenas substâncias simples dentro do espectro da gasolina, como exemplo o benzeno (1993a), metil terc-butil éter (MTBE) (1993a) e tolueno (1994b). Em razão desta dificuldade de interpretação, um pré-tratamento de dados é indicado, pois poderá melhorar em muito os resultados, desde que se remova ou minimize interferências multiplicativas devido a dispersão, efeitos de partículas, ruído instrumental, mudanças na linha de base, entre outras (WU *et al.*, 1999).

Deve-se observar que uma impressão digital de sucesso envolve amostragem apropriada, técnicas analíticas e estratégias de interpretação de dados (WANG; FINGAS, 2003). Desta forma, pode-se encontrar correlações mais aprimoradas para a gasolina nacional e aplicá-las para obtenção de previsões acuradas, com valores próximos às análises experimentais padrão ASTM e NBR, adotadas pela ANP como referências de qualidade para a gasolina brasileira.

1.2 Objetivo

A proposta deste trabalho é a aplicação de técnica analítica relativamente rápida de identificação da composição, como exemplo a espectrometria no infravermelho, para redução significativa do tempo de análise para cerca de 5 minutos, viabilizando a aplicação prática de correlações matemáticas para a previsão das propriedades físico-químicas e composição química da gasolina. Ao otimizar o tempo de análise e encontrar nova correlação matemática, o método

proposto pode ser aplicado para um monitoramento rápido e eficaz da gasolina nacional.

1.3 Tópicos Principais

Este trabalho está dividido em duas grandes etapas:

- a) obtenção de dados precisos de composição química e propriedades físico-químicas de diversas amostras de gasolina para montagem de um banco de dados;
- b) utilização do banco de dados para montagem de correlações utilizando-se diversas ferramentas matemáticas e pré-tratamentos de dados.

Para melhor compreensão da etapa (a), os fundamentos e trabalhos desenvolvidos até o momento da técnica analítica de espectroscopia no infravermelho, estão apresentados no capítulo 2. Esta técnica fornece uma matriz de dados de entrada para posterior modelagem matemática. A matriz obtida está representada na forma de [número de amostra x transmitância].

Para obtenção da composição química da gasolina, utilizou-se a técnica de cromatografia gasosa com detector FID (*Flame Ionization Detector*) e um programa específico para quantificação dos compostos conhecidos denominado DHA (*Detailed Hydrocarbon Analysis*). Para identificação de compostos desconhecidos na gasolina, aplicou-se a técnica de cromatografia gasosa com detector de massas (GC-MS). Deste modo os dados de composição química foram calibrados, melhorando a qualidade das matrizes de saída. Como um exemplo, a matriz [número de amostra x % aromáticos] foi obtida. Fundamentos e trabalhos realizados até o momento destas técnicas estão apresentados no capítulo 3.

No capítulo 4 estão apresentados os principais fundamentos de dois tipos de modelagem matemática: PCR (*Principal Component Regression*), PLS (*Partial Least Square*). Técnicas para pré-tratamentos das matrizes de entrada e saída também são apresentadas neste capítulo, compreendendo-se melhor a etapa (b) deste trabalho. Todas estas técnicas matemáticas utilizam as matrizes obtidas na etapa (a) para obtenção de modelos cuja principal finalidade é a previsão de propriedades físico-químicas e composição química da gasolina.

Considerando-se que todas as técnicas analíticas e matemáticas utilizadas neste trabalho são tradicionais, não se pretende apresentá-las em nível de detalhamento muito profundo. Deve-se salientar que o nível de detalhamento das informações apresentadas nos capítulos 2, 3 e 4 são suficientes e relevantes para entendimento deste trabalho, cujo esquema está apresentado na figura 1 abaixo:

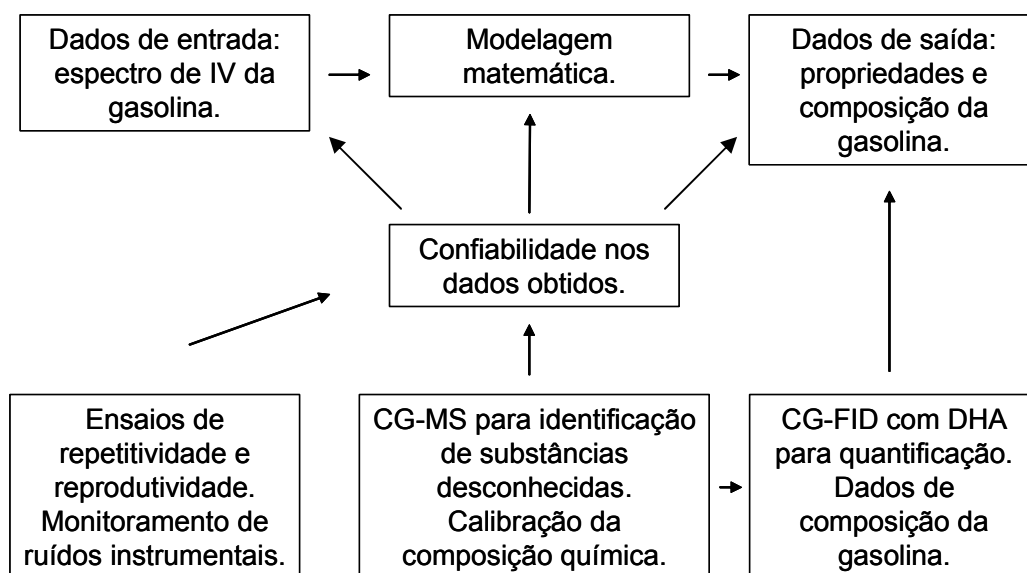


FIGURA 01 – ESQUEMA DE TRABALHO DESENVOLVIDO NO PRESENTE ESTUDO

Como apresentado na figura 1, obteve-se os espectros de amostras de gasolina, coletadas durante um período de 22 meses, para montagem da matriz de entrada [X]. Para as mesmas amostras coletadas, realizou-se os ensaios em laboratório para obtenção das propriedades físico-químicas, e análise DHA, para obtenção da composição média de cada amostra, por cromatografia gasosa. Cada propriedade físico-química e grupo químico, formaram as diversas matrizes de resposta [Y]. Aplicaram-se as ferramentas matemáticas para obtenção de modelos matemáticos, cuja finalidade é realizar previsões de composição e propriedades físico-químicas de gasolinas desconhecidas.

Evidentemente necessita-se de um banco de dados precisos para que se possa realizar previsões. Para isso, utilizou-se GC-MS para identificar a porção de compostos desconhecidos presentes na gasolina, e melhorar os resultados de composição química obtidos por cromatografia. Além disso, os equipamentos utilizados, além de estarem calibrados, foram monitorados por ensaios de

repetitividade e reprodutibilidade, garantindo os resultados das propriedades físico-químicas.

No capítulo 5 estão descritos os materiais, equipamentos e métodos utilizados neste estudo, enquanto que o capítulo 6 detalha resultados obtidos na modelagem matemática, espectrometria de massas, ionização química e espectroscopia no infravermelho médio. Finalmente, o capítulo 7 refere-se às conclusões.

2 FUNDAMENTOS DE ESPECTROSCOPIA

A espectroscopia estuda a interação da radiação eletromagnética com a matéria, sendo o estudo dos níveis de energia de átomos ou moléculas um dos seus principais objetivos.

Normalmente, as transições eletrônicas são situadas na região do ultravioleta ou visível, as vibracionais na região do infravermelho e as rotacionais na região de microondas e, em alguns casos, também na região do infravermelho distante ou afastado.

Muito do atual conhecimento acerca da estrutura da matéria foi baseada em investigações espectroscópicas, as quais resultaram em contribuições notáveis para o estado da arte da física atômica e molecular, assim como da química e da biologia molecular.

Espectros de emissão e/ou absorção gerados quando a radiação interage com os átomos e/ou moléculas da matéria, podem dar informações tais como a estrutura molecular e a interação de moléculas com seus vizinhos. Como a quantidade de informação que se pode obter de um espectro depende essencialmente do tipo de fonte de radiação empregado frente às amostras, além da resolução temporal ou espectral dos instrumentos de dispersão utilizados e da sensibilidade de detecção que se pode atingir, torna-se relevante lembrar alguns conceitos básicos relativos à espectroscopia (DEMTRÖDER, 1996).

2.1 Espectroscopia e Espectrometria

Como já mencionado, o termo espectroscopia ótica pode ser atribuído a qualquer tipo de interação da radiação eletromagnética com a matéria. Duas classes mais gerais de tais interações são as de absorção e emissão. Conseqüentemente, uma pode ser distinguida da outra pelos espectros de absorção e espectros de emissão. Tecnicamente, em ambos os casos, o espectro deverá permitir a medida de intensidade da radiação (luz); entretanto, a faixa de aplicação, o arranjo para obtenção das medidas e a interpretação dos resultados terão suas características específicas e poderão diferir significativamente (TKACHENKO, 2006, p. 14).

É importante mencionar que, desde que a energia de um fóton determina a frequência (e comprimento de onda) de uma onda eletromagnética, o espectro de absorção de qualquer sistema representa seu espectro energético. Diante disso, o comprimento de onda, frequência e energia são medidas equivalentes na espectroscopia, resultando em numerosas unidades utilizadas para caracterizar um mesmo parâmetro - energia de transição (TRACHENKO, 2006, p. 8).

Outrossim, cabe ressaltar que hoje em dia, o termo espectroscopia (interação dos diferentes tipos de radiação com a matéria) ampliou-se para espectrometria (medida de intensidade de radiação com detectores fotoelétricos), para incluir as interações entre a matéria e outras formas de energia, tais como ondas acústicas e produção de partículas como íons ou elétrons (SKOOG; HOLLER; NIEMAN, 2001, p. 122).

2.2 Radiação Eletromagnética

A radiação eletromagnética é um tipo de energia que assume numerosas formas, das quais, calor radiante e luz visível são as mais facilmente reconhecidas. Manifestações menos óbvias incluem radiações de raios gama, raios X, ultravioleta, microondas e radiofrequência.

Como mostrado na figura 2, o espectro eletromagnético abrange uma enorme faixa de comprimento de onda e frequências. As divisões estão fundamentadas em métodos que geram e detectam os vários tipos de radiação. Muitas sobreposições estão evidenciadas. Também nota-se que a porção visível do espectro à qual o olho humano é sensível, é fina comparada a outras regiões espectrais (SKOOG; HOLLER; NIEMAN, 2001, p.125).

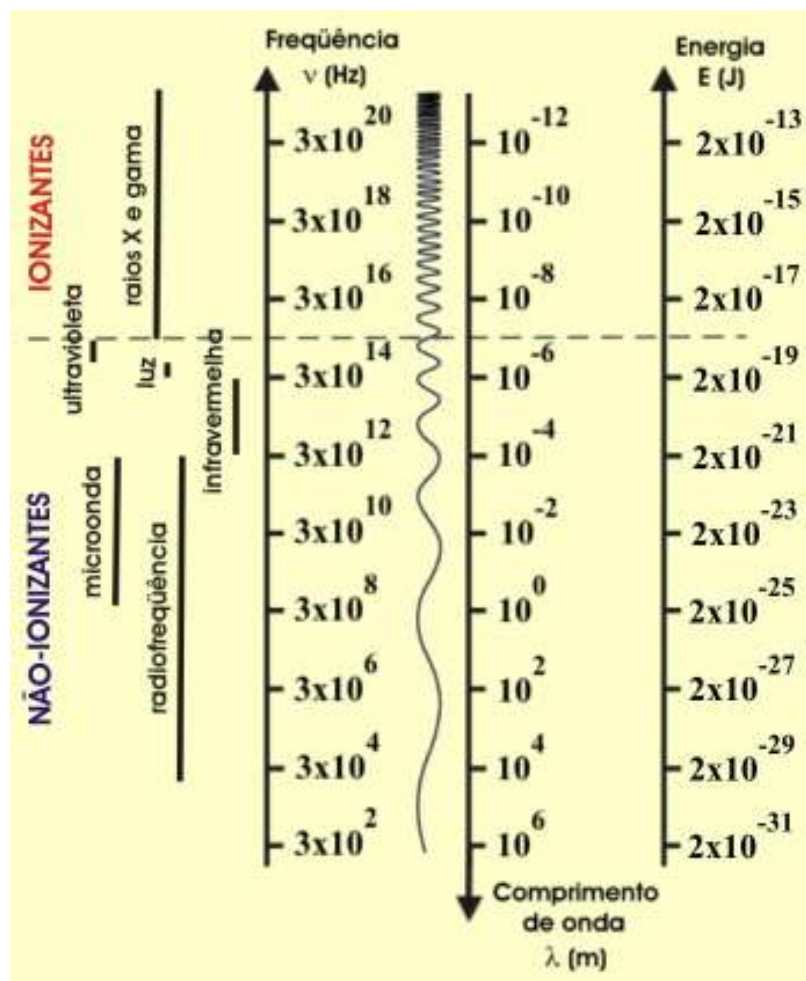


FIGURA 02 – ESQUEMA DE ESPECTRO ELETROMAGNÉTICO

A radiação eletromagnética é um termo técnico para a luz, mas qualquer luz, variando desde radio frequência até os raios gama. Sendo assim, como o próprio nome sugere, luz de todos os tipos é irradiada, associada a campos elétricos e magnéticos (LINDON; TRANTER; HOLMES, 2000, v.1., p 397).

2.3 Absorção da Radiação

Após interação com a matéria, uma luz incidente de intensidade I_0 pode ser parcialmente refletida na interface ótica (I_R), pode ser espalhada (I_S) e absorvida na amostra (I_A), e a parte remanescente será transmitida (I_T) (figura 03). De acordo com a lei da conservação de energia, o balanço de energia para a luz incidente pode ser escrita como:

$$I_0 = I_A + I_T + I_R + I_S \quad (2.1)$$

As intensidades I_0 , I_T , I_R , I_S podem ser facilmente medidas colocando-se um detector na posição correspondente. Como toda a informação química sobre a amostra está contida em I_A , cujo valor não pode ser medido diretamente, I_A poderá ser obtida por meio da equação 2.1. Além disso, cabe ressaltar que em todos os espectrômetros comerciais somente um detector é usado para medir um par de valores de intensidades (I_0 e também I_T ou I_R ou I_S). Por isso, o preparo de amostra deve ser minucioso, pois desta maneira, pode-se fazer as intensidades remanescentes caírem a zero ou pelo menos muito próximo de zero. Caso estas considerações básicas sejam negligenciadas, ocorrerão erros de medida, os quais nunca poderão ser eliminados por subsequente tratamento digital de dados (GAUGLITZ; VO-DINH, 2003. v.1. p. 70).

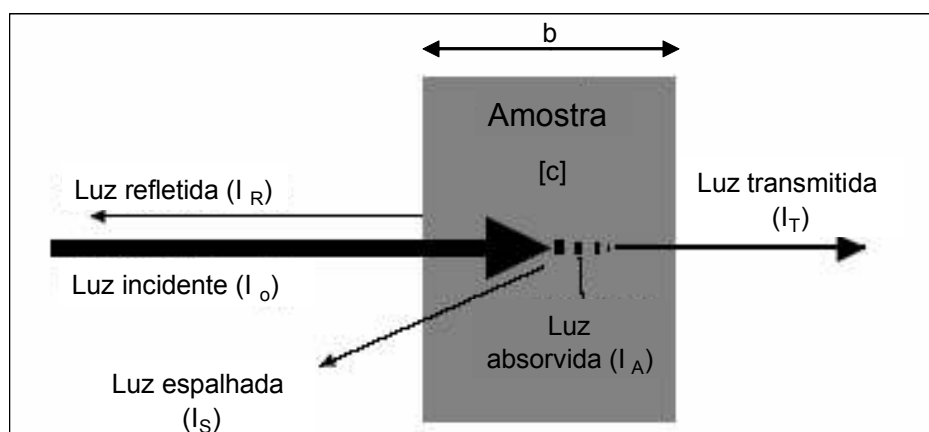


FIGURA 03 – INTERAÇÃO DA RADIAÇÃO ELETROMAGNÉTICA COM UMA AMOSTRA

FONTE: GAUGLITZ e VO-DINH (2003)

Na nomenclatura da espectroscopia, absorção é um processo no qual a espécie química, em um meio transparente, atenua seletivamente (diminui a intensidade de) certas frequências da radiação eletromagnética.

Como características absorventes de espécies são convenientemente descritas em um espectro de absorção, o qual é um gráfico de uma função da atenuação do feixe de radiação versus comprimento de onda, frequência ou número de onda, dois termos são comumente empregados como medidas quantitativas da atenuação do feixe: transmitância e absorbância (SKOOG; HOLLER; NIEMAN, 2001, p. 147).

2.3.1 Transmitância e absorbância

A figura 03 representa um feixe de radiação paralela antes e após a passagem através de um meio com espessura **b** cm e uma concentração **c** de uma espécie absorvente. Como consequência de interações entre fótons e substâncias adsorventes, a força do feixe é atenuada de **P_o** a **P**. A transmitância **T** do meio é então a fração da radiação incidente transmitida pelo meio :

$$T = P / P_o \quad (2.2)$$

Também cabe esclarecer que a transmitância é freqüentemente expressa em porcentagem:

$$\%T = (P / P_o).100\% \quad (2.3)$$

Em contrapartida, a absorbância **A** de um meio é definida pela equação:

$$A = -\log T = \log (P / P_o) \quad (2.4)$$

Nota-se que, contrário à transmitância, a absorbância de um meio aumenta quando a atenuação do feixe torna-se maior (SKOOG; HOLLER; NIEMAN, 2001, p. 147). É importante salientar que quando a radiação atravessa uma camada de sólido, líquido ou gás, certas frequências podem ser eliminadas seletivamente por absorção em um processo na qual a energia eletromagnética é transferida aos átomos, íons ou moléculas que compõem a amostra. A absorção faz com que esses componentes passem de um estado normal à temperatura ambiente (estado fundamental), a um ou mais estados excitados de energia superior. De acordo com a teoria quântica, os átomos, moléculas ou íons têm somente um número limitado de níveis de energia discretos, de modo que para que se produza a absorção da

radiação, a energia dos fótons excitadores deve coincidir exatamente com a diferença de energia entre o estado fundamental e um dos estados excitados das espécies absorventes. Como essas diferenças de energia são características para cada espécie, o estudo das frequências da radiação absorvida proporciona um meio para caracterizar os componentes de uma amostra (SKOOG; HOLLER; NIEMAN, 2001, p. 141).

2.3.2 Lei de Lambert-Beer

Muitos métodos aplicáveis para análise dependem da interação entre a luz (UV-visível-IV) e matéria. Os comprimentos de onda nas quais as interações ocorrem são específicas para as substâncias (impressão digital espectral) e isto forma a base da análise qualitativa usando a luz. Além disso, as intensidades que são medidas em tais interações estão relacionadas com a concentração da substância em particular. Portanto, a análise quantitativa, que freqüentemente é bastante precisa, pode ser executada (SVANBERG,1992, cap.5). A porção do espectro eletromagnético, indicando regiões comumente utilizadas para análise UV/Vis e IV, está apresentada na figura 04, a seguir.

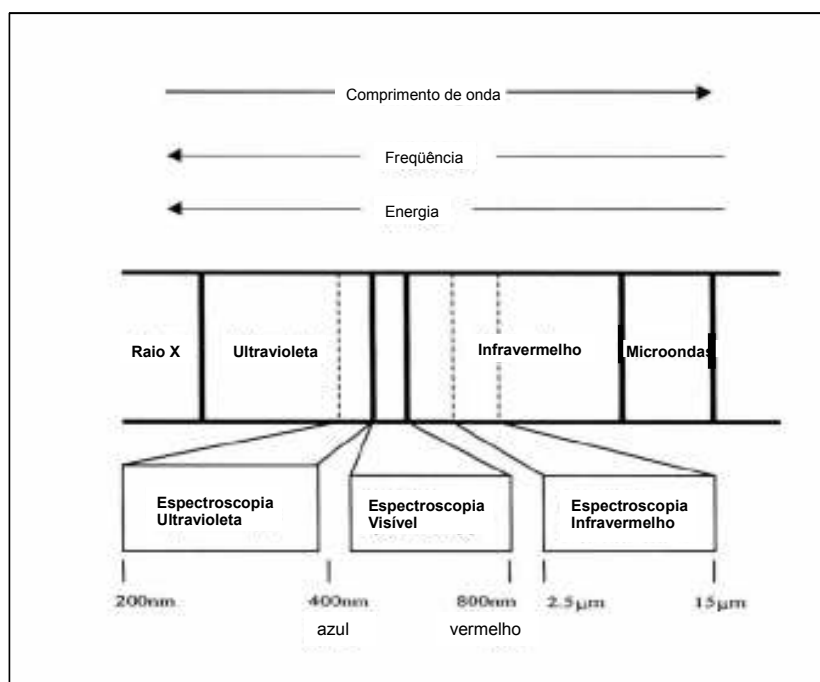


FIGURA 04 – ESPECTRO ELETROMAGNÉTICO DAS REGIÕES DE ULTRAVIOLETA, VISÍVEL E INFRAVERMELHO
FONTE: MULLER M. R. (2001).

Como as análises por técnicas óticas são usualmente realizadas pela medida de absorção, é importante relacionar corretamente a absorção com a concentração. Esta relação é denominada Lei de Lambert Beer. Para a radiação monocromática, a absorbância é diretamente proporcional ao caminho ótico **b** através do meio, e à concentração **c** das espécies absorventes. Esta relação é dada por (SKOOG; HOLLER; NIEMAN, 2001, p. 147):

$$A = a.b.c \quad (2.5)$$

onde:

a = constante de proporcionalidade (absortividade);

b = caminho ótico;

c = concentração;

A = absorbância.

A magnitude e dimensões de **a** dependerão obviamente das unidades usadas por **b** e **c**. Para soluções com uma espécie absorvente, **b** é freqüentemente dado em centímetros e **c** em g/L. A absortividade então possui unidade de L/(g.cm).

A lei de Beer também pode ser aplicada em uma solução contendo mais do que um tipo de substância absorvente. Considerando-se que não existe interação entre as várias espécies, a absorbância total para um sistema com multicomponentes é dada por (SKOOG; HOLLER; NIEMAN, 2001, p. 325):

$$A_{\text{total}} = A_1 + A_2 + \dots + A_n \quad (2.6)$$

2.3.3 Espectros Típicos

Espectros de absorção no UV/VIS (ultravioleta/visível) são obtidos usualmente a partir de amostras gasosas ou de uma solução diluída no analito (substância que se deseja analisar), em um solvente transparente. Necessariamente, o eixo vertical do gráfico deve ser transmitância (%), absorbância ou logaritmo de absorbância. No eixo horizontal normalmente está expresso o comprimento de onda em nm.

Em um espectro típico de infravermelho, o eixo horizontal mais usual é em número de onda (cm^{-1}) e o eixo vertical em transmitância (%) (SKOOG; HOLLER; NIEMAN, 2001, p.141-142).

2.4 Espectroscopia de Absorção no Infravermelho

A região do infravermelho limita-se à radiação na faixa de número de ondas de 12.800 a 10 cm^{-1} ou em comprimento de onda de 0,78 a 1000 μm . Convenientemente, para o ponto de vista de aplicações e instrumentação, o infravermelho está dividido em IV próximo, médio e distante. Os limites para cada um estão mostrados na tabela 1. A maioria das aplicações analíticas tem sido restringida a uma porção da região de infravermelho médio estendendo-se de 4000 para 400 cm^{-1} (2,5 a 25 μm). Entretanto, um número crescente de aplicações de espectroscopia no infravermelho próximo e distante tem sido citado na literatura (SKOOG; HOLLER; NIEMAN, 2001, p. 409).

TABELA 01 – DIVISÕES DA REGIÃO DO INFRAVERMELHO.

Região	Faixa de Comprimento de onda (λ), μm .	Faixa de Número de onda (ν), cm^{-1} .	Faixa de Frequência (ν), Hz.
Próximo	0,78 a 2,5	12.800 a 4.000	$3,8 \times 10^{14}$ a $1,2 \times 10^{14}$
Médio	2,5 a 50,0	4.000 a 200	$1,2 \times 10^{14}$ a $6,0 \times 10^{12}$
Distante	50,0 a 1.000,0	200 a 10	$6,0 \times 10^{12}$ a $3,0 \times 10^{11}$
Mais Usado	2,5 a 15,0	4.000 a 670	$1,2 \times 10^{14}$ a $2,0 \times 10^{13}$

FONTE: SKOOG; HOLLER e NIEMAN (2001)

De um modo geral, a radiação no infravermelho de frequência menor que 100 cm^{-1} , quando absorvida por uma molécula orgânica, converte-se em energia de rotação molecular. O processo de absorção é quantizado e o espectro de rotação das moléculas consiste em uma série de linhas. A radiação infravermelha de

freqüência na faixa de 10.000 a 100 cm^{-1} , quando absorvida, converte-se em energia de vibração molecular. O processo também é quantizado, porém o espectro vibracional costuma aparecer como uma série de bandas ao invés de linhas porque a cada mudança de energia vibracional corresponde uma série de mudanças de energia rotacional. As linhas se sobrepõem dando lugar às bandas observadas. Estas bandas são de rotação-vibração, particularmente as que ocorrem entre 4.000 e 666 cm^{-1} , que são as mais observadas. Também se faz necessário salientar que a freqüência ou o comprimento de onda de uma absorção depende das massas relativas dos átomos, das constantes de força das ligações e da geometria dos átomos.

Ademais, cabe ressaltar que existem dois tipos de vibrações moleculares: as deformações axiais e as deformações angulares. Uma vibração de deformação axial é um movimento rítmico ao longo do eixo da ligação de forma que a distância interatômica (entre átomos) aumente e diminua alternadamente. As vibrações de deformações angulares correspondem a variações de ângulos de ligação, seja internamente em um grupo de átomos, seja deste grupo de átomos em relação à molécula como um todo. Assim, a deformação angular assimétrica no plano, a deformação angular assimétrica fora do plano, e as vibrações torcionais, pertencem a esta última definição e envolvem uma mudança no ângulo de ligação com referência a um conjunto de coordenadas colocadas de modo arbitrário na molécula.

Somente as vibrações que resultam em uma alteração rítmica no momento dipolar da molécula são observadas no infravermelho convencional. O campo elétrico alternado, produzido pela mudança de distribuição da carga que acompanha a vibração, acopla a vibração molecular com o campo elétrico oscilante da radiação eletromagnética e o resultado do processo é a absorção de energia radiante. As figuras 5 e 6 mostram os vários modos de deformação axial e angular possíveis para um grupo AX_2 de uma molécula, por exemplo o CH_2 de uma molécula de hidrocarboneto. A deformação axial simétrica não é ativa no infravermelho pois não produz alteração no momento dipolar da molécula (SILVERSTEIN; BASSLER; MORRILL, 1994, p 71-72).

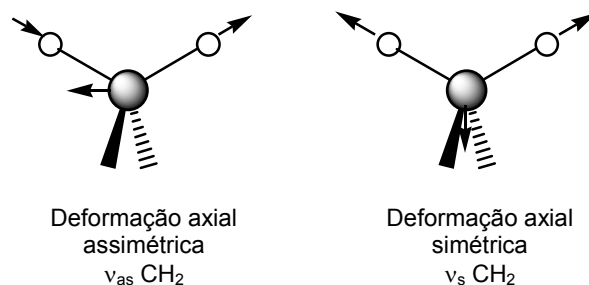


FIGURA 05 – MODOS VIBRACIONAIS PARA UM GRUPO CH_2 .
VIBRAÇÕES QUE GERAM DEFORMAÇÃO AXIAL
FONTE: SILVERSTEIN; WEBSTER (1998)

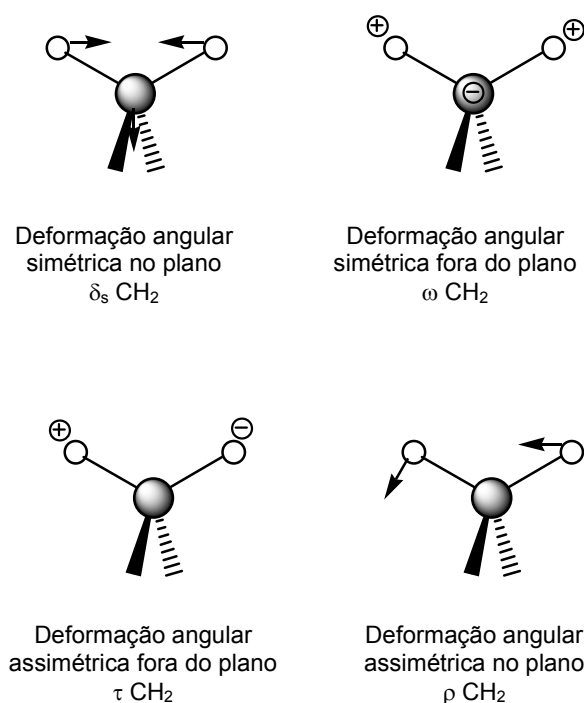


FIGURA 06 – MODOS VIBRACIONAIS PARA UM GRUPO CH_2 . VIBRAÇÕES
DE DEFORMAÇÃO ANGULAR
FONTE: SILVERSTEIN; WEBSTER (1998)
NOTA: + e - indicam movimento perpendicular ao plano da página.

A espectroscopia no IV possui vasta aplicação em análises qualitativas e quantitativas. Seu uso mais importante tem sido na identificação de compostos orgânicos, cujos espectros no infravermelho médio são geralmente complexos e fornecem numerosos mínimos e máximos, que são úteis para fins de comparação. Realmente, o espectro no infravermelho médio de um composto orgânico fornece

uma impressão digital, a qual é facilmente distinguida de padrões de absorção de todos os outros compostos; apenas isômeros óticos absorvem exatamente da mesma forma (SKOOG; HOLLER; NIEMAN, 2001, p. 417-419).

Contudo, algumas limitações, para uma análise quantitativa, são inerentes à técnica de espectroscopia no infravermelho, dentre as quais figura o freqüente não cumprimento da lei de Beer e a complexidade dos espectros, sendo que este último aumenta a probabilidade de superposição dos picos de absorção. Além disso, a intensidade dos picos e os efeitos da radiação espúria fazem com que as medidas de absorção dependam de uma forma crítica da largura da fenda do monocromador, e do ajuste do comprimento de onda, assim como o uso pouco prático de cubetas estreitas, requeridas para muitas análises, as quais conduzem a importantes incertezas analíticas. Por estes motivos, os erros analíticos associados a uma análise quantitativa no infravermelho, poucas vezes podem reduzir-se ao nível associado com os métodos de ultravioleta e visível, mesmo quando realizada com muito cuidado e atenção (SKOOG; HOLLER; NIEMAN, 2001, p. 449).

2.4.1 Interpretação dos Espectros de Infravermelho

Um resumo de freqüências de absorção das moléculas orgânicas no infravermelho é amplamente divulgado na literatura, onde estão registradas as freqüências características de certos grupos (tabela 2). Estas freqüências características podem variar devido a interações complexas entre os grupos nas moléculas. As bandas de absorção podem, entretanto, corresponder predominantemente a um único modo vibracional. Certas bandas de absorção, como, por exemplo, aquelas provenientes dos modos de deformação axial de C-H, O-H e C=O, permanecem razoavelmente fixas no espectro, independentemente de possíveis interações. A posição exata da banda de absorção revela detalhes importantes da estrutura, assim como as mudanças nos contornos das bandas (SILVERSTEIN; BASSLER; MORRILL, 1994, p. 79).

TABELA 02 - FREQUÊNCIAS DE GRUPO DE ALGUNS GRUPOS ORGÂNICOS

Ligação	Tipo de Composto	Intervalo de Frequência, cm^{-1}	Intensidade
C-H	Alcanos	2850-2970	Forte
		1340-1470	Forte
C-H	Alcenos	3010-3095	Média
		675-995	Forte
C-H	Alcinos	3300	Forte
C-H	Anéis aromáticos	3010-3100	Média
		690-900	Forte
O-H	Álcoois e fenóis monoméricos	3590-3650	Variável
	Álcoois e fenóis com ligações de hidrogênio	3200-3600	Variável, às vezes alargada
	Ácidos carboxílicos monoméricos	3500-3650	Média
	Ácidos carboxílicos com ligações de hidrogênio	2500-2700	Alargada
N-H	Aminas, amidas	3300-3500	Média
C=C	Alcenos	1610-1680	Variável
C=C	Anéis aromáticos	1500-1600	Variável
C=C	Alcinos	2100-2260	Variável
C-N	Aminas, amidas	1180-1360	Forte
C=N	Nitrilas	2210-2280	Forte
C-O	Álcoois, éteres, ácidos carboxílicos, ésteres	1050-1300	Forte
C=O	Aldeídos, cetonas, ácidos carboxílicos, ésteres	1690-1760	Forte
NO ₂	Nitro compostos	1500-1570	Forte
		1300-1370	

FONTE: SKOOG; HOLLER e NIEMAN (2001)

Existe um número de fatores que podem complicar a interpretação do espectro infravermelho. Estes fatores devem ser considerados ao se estudar o espectro, pois resultam em importantes mudanças no mesmo e podem resultar em má interpretação das bandas. Os fatores que devem ser considerados são:

- as bandas de sobretons em um espectro infravermelho são bandas análogas e múltiplas da frequência de absorção fundamental. Os níveis de energia requeridos para o primeiro sobreton são o dobro da fundamental. Desde que a energia é proporcional à frequência absorvida e esta é proporcional ao comprimento de onda, o primeiro sobreton aparecerá no espectro no dobro do comprimento de onda do fundamental.
- outro fator a ser estudado refere-se às bandas de combinação. Elas aparecem quando duas bandas fundamentais (frequências 1 e 2) absorvem energia simultaneamente e a banda resultante aparecerá no comprimento de onda correspondente à soma das duas frequências.

- c) o efeito da ressonância de Fermi leva ao aparecimento de duas bandas juntas onde apenas uma é esperada. Quando uma banda de sobretom ou combinação tem a mesma frequência, ou similar que a fundamental, duas bandas aparecem divididas ao lado do valor esperado e têm mais ou menos a mesma intensidade.
- d) vibrações no esqueleto de moléculas acoplam-se e não estão restritas a uma ou duas ligações, mas envolvem uma grande parte do esqueleto de carbono e átomos de oxigênio e nitrogênio se estiverem presentes. Os níveis de energia se misturam, resultam em um mesmo número de modos vibracionais, mas em frequências diferentes, e as bandas não poderão ser atribuídas a uma ligação. Isto é bastante comum e ocorre quando as ligações adjacentes possuem frequências similares. O acoplamento usualmente ocorre entre estiramentos C-C, C-O, C-N e movimentos de *rocking* (rotação) e *wagging* (balanço, sacudida, wag) de C-H (STUART, 2004, p. 11-12).

As duas áreas mais importantes para exame preliminar dos espectros são as regiões de 4000 a 1300 cm^{-1} e 909 a 650 cm^{-1} . A faixa de menor comprimento de onda é a chamada região dos grupamentos funcionais (figura 07). Ocorrem nessa região as absorções correspondentes a grupos funcionais importantes tais como O-H, N-H e C=O. A ausência de absorção nas regiões características dos vários grupos funcionais é habitualmente usada como evidência para a não existência destes grupamentos na estrutura (SILVERSTEIN; BASSLER; MORRILL, 1994).

O estiramento da ligação O-H (deformação axial) produz uma banda alargada na faixa de 3700 – 3600 cm^{-1} . Por comparação, o estiramento N-H, observa-se usualmente entre 3400 – 3300 cm^{-1} . Esta banda é geralmente mais estreita que o estiramento O-H e pode ser diferenciada dos estiramentos C-H de compostos alifáticos que ocorrem na faixa de 3000 – 2850 cm^{-1} . Se a ligação C-H é adjacente a uma dupla ligação ou anel aromático, o estiramento C-H passa a absorver entre 3100 - 3000 cm^{-1} . As principais bandas na região de 2000-1500 cm^{-1} aparecem devido aos estiramentos C=C e C=O (grupo carbonila). O estiramento da

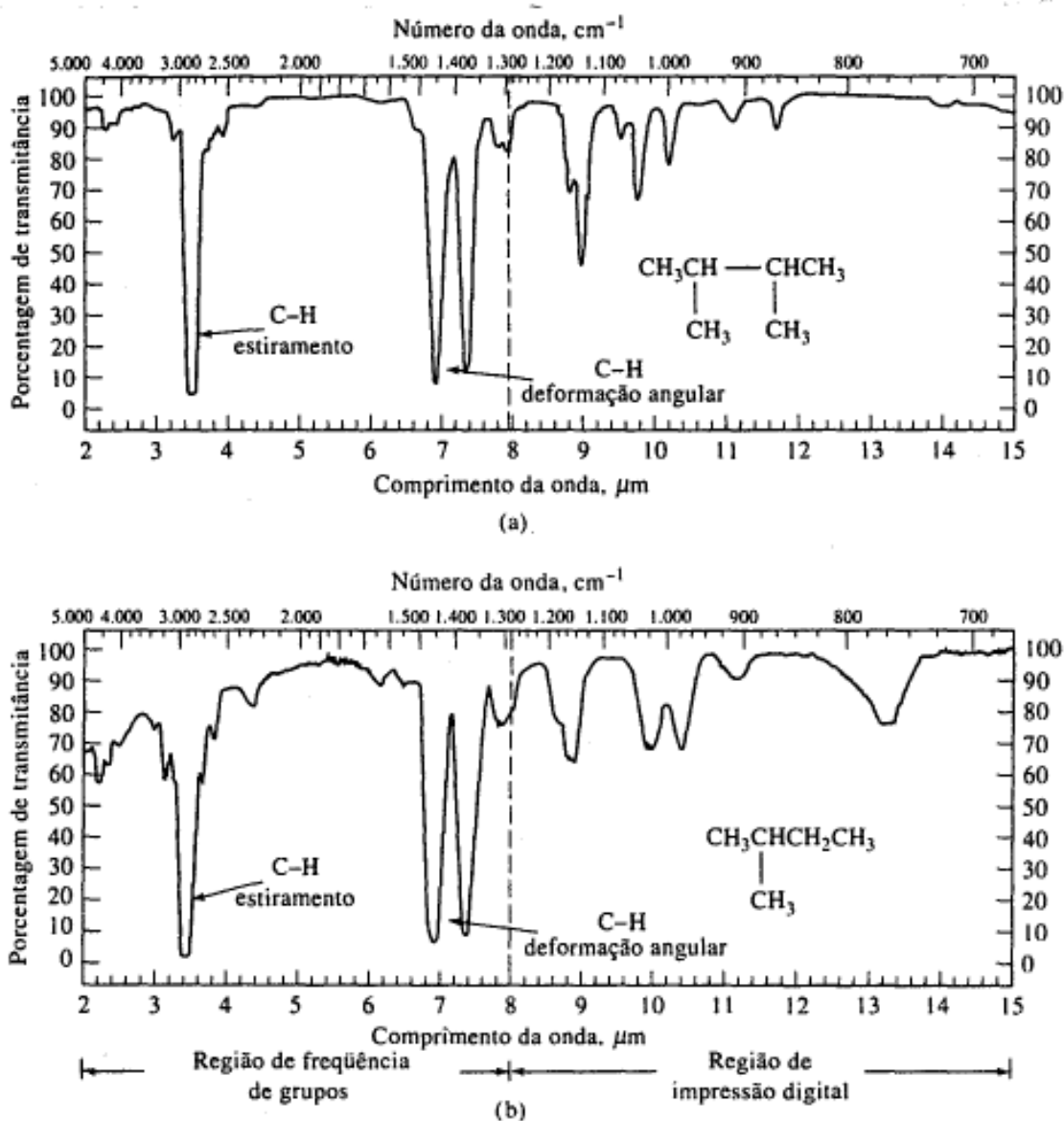


FIGURA 07 – DIVISÃO DAS REGIÕES PRINCIPAIS DE UM ESPECTRO NO INFRAVERMELHO MÉDIO

FONTE: SKOOG; HOLLER e NIEMAN (2001)

carbonila é uma das bandas mais fáceis de reconhecer em um espectro infravermelho. Pode-se assumir que cada banda em um espectro infravermelho pode ser nomeada devido a uma deformação particular da molécula. Isto é possível para muitas bandas, particularmente vibrações de estiramento de ligações que são “bem comportadas”. Entretanto, muitas vibrações não são tão bem comportadas e podem variar em centenas de números de onda, mesmo em moléculas similares. Isto se aplica na maioria das vibrações esqueléticas e deformações angulares, os quais absorvem entre $1500\text{-}650\text{ cm}^{-1}$.

Um espectro de uma molécula pode conter uma centena ou mais de bandas de absorção, mas não há necessidade de nomear a maioria. O espectro pode ser considerado como uma “impressão digital” da molécula e portanto esta região é referida como região de impressão digital (909 a 650 cm^{-1}). O espectro infravermelho de isômeros geralmente são muito diferentes nessa região (figura 08).

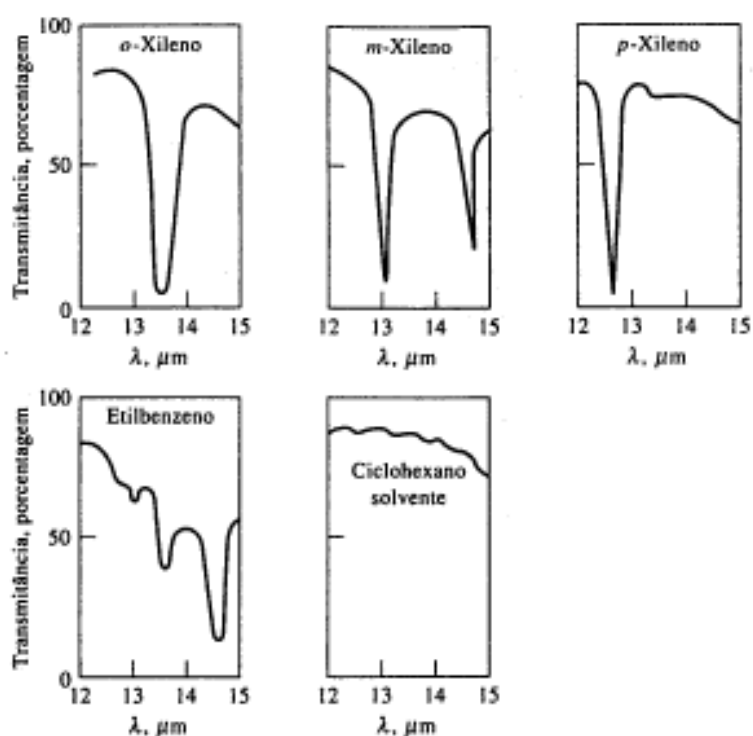


FIGURA 08 - ESPECTROS DE ISÔMEROS C_8H_{10} EM CICLOHEXANO
 FONTE: SKOOG; HOLLER e NIEMAN (2001)

Não é sempre possível uma identificação inequívoca examinando-se o espectro infravermelho de um composto individualmente. Normalmente utiliza-se o infravermelho em conjunto com outras técnicas, tais como métodos cromatográficos, espectrometria de massas, RMN e outras técnicas espectroscópicas (STUART, 2004, p. 46-49).

2.4.2 Técnica de Refletância Total Atenuada

A espectroscopia por ATR (Attenuated Total Reflectance) utiliza o fenômeno da reflexão interna total (figura 09). Um feixe de radiação entra em um cristal que permite a reflexão interna total, quando o ângulo de incidência na interface entre a amostra e o cristal é maior que o ângulo crítico (função dos índices de refração das

duas superfícies). O feixe penetra em um comprimento de onda acima da superfície refletora e quando um material que absorve seletivamente a radiação está em contato com esta superfície, o feixe perde energia no comprimento de onda onde o material absorve. A radiação atenuada resultante é medida e registrada em função do comprimento de onda e eleva as características de absorção espectral da amostra. Os cristais utilizados em células de ATR são feitos de materiais com baixa solubilidade em água e possuem índice de refração muito alto. Tais materiais incluem seleneto de zinco (SeZn), germânio (Ge) e iodeto de tálio (TI I) (STUART, 2004, p. 33).

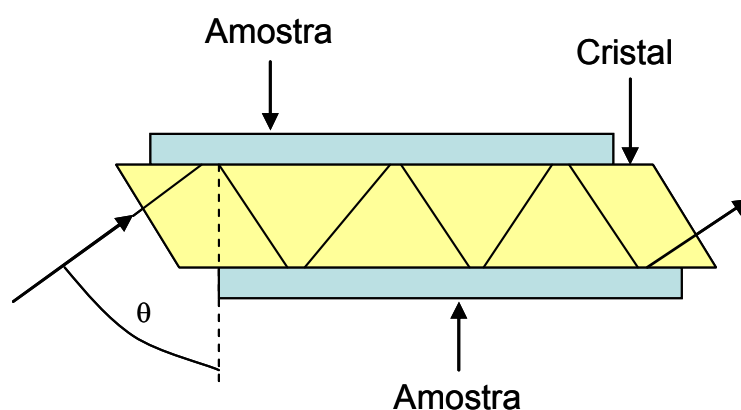


FIGURA 09 – ESQUEMA DE UMA TÍPICA CÉLULA DE ATR
FONTE: STUART (2004).

A técnica ATR requer pouco preparo de amostra e é uma das técnicas mais versáteis com relação à amostragem de líquidos. O espectro é similar ao do infravermelho convencional, porém a intensidade das bandas são maiores em comprimentos de onda maiores, devido à maior profundidade de penetração do feixe de radiação. Cristais com reflexão simples ou múltipla podem ser usados (figura 10). A refletividade medida depende do número de reflexões assim como da eficiência de contato entre a amostra e a superfície do cristal (GAUGLITZ; VO-DINH, 2003).

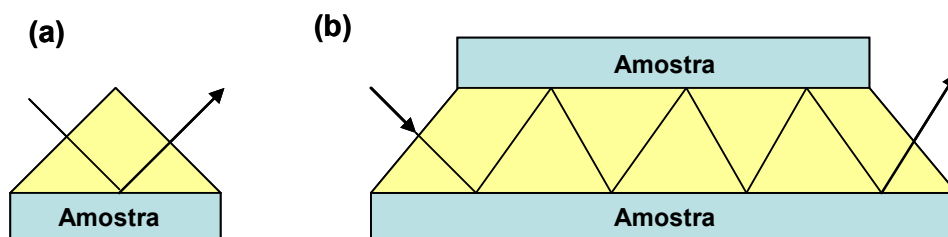


FIGURA 10 – AMOSTRAGEM POR ATR: (A) CRISTAL PARA MEDIDA POR SIMPLES REFLEXÃO; (B) CRISTAL PARA MEDIDA POR MÚLTIPLA REFLEXÃO
FONTE: GAUGLITZ e VO-DINH (2003)

3 FUNDAMENTOS DE CROMATOGRAFIA A GÁS E ESPECTROMETRIA DE MASSAS

3.1 Cromatografia a gás

3.1.1 Introdução

A cromatografia a gás (CG) é uma forma específica de um processo mais geral de separação cromatográfica. Todas as formas de cromatografia envolvem a distribuição ou partição de um composto entre duas diferentes fases, uma móvel e a outra estacionária. Em uma mistura, a partição de compostos em diferentes graus entre as duas fases depende de suas respectivas solubilidades em cada fase. Assim, os compostos em uma mistura são carregados pela fase móvel sobre um leito fixo de fase estacionária, os quais retardados em diferentes extensões devido às suas diferentes solubilidades, serão separados fisicamente. Aqueles com grande solubilidade na fase estacionária demorarão mais para sair do leito do que os de menor solubilidade. Na cromatografia a gás a fase móvel é um gás inerte e a fase estacionária é um composto líquido de alta massa molecular, o qual está depositado sobre a superfície de partículas finamente divididas ou nas paredes de um longo tubo capilar (figura 11).

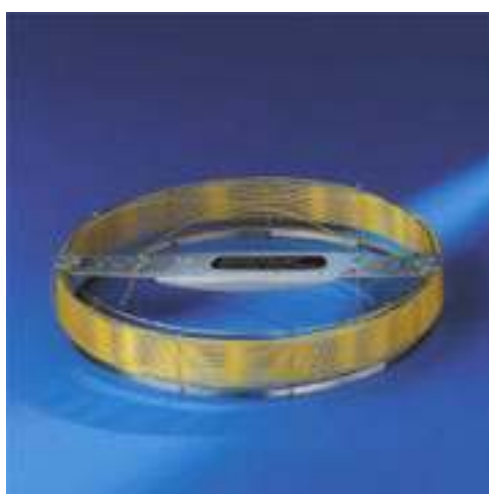


FIGURA 11 – FOTO DE UMA COLUNA
CAPILAR
FONTE: VARIAN INC.

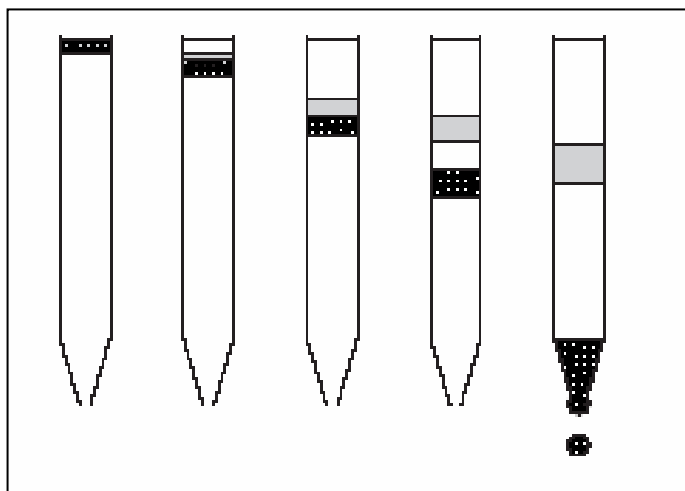


FIGURA 12 – SEPARAÇÃO DE DOIS SOLUTOS EM
UMA COLUNA CROMATOGRÁFICA
FONTE: HARVEY (2000)

A figura 12 ilustra o princípio de partição na cromatografia a gás, na qual ocorre a separação de duas substâncias após contato com a fase estacionária da coluna cromatográfica. Nota-se que a solubilidade das duas substâncias na fase estacionária é diferente e, por isto, ocorre a separação física.

O instrumento para CG, mostrado esquematicamente na figura 13, possui componentes simples. Geralmente gás hélio, hidrogênio ou nitrogênio comprimidos em cilindros são usados como gás carreador. O fluxo do gás dentro de um dispositivo de injeção de amostra com controle de temperatura, é controlado por reguladores de pressão e válvulas de medição de gases. Uma coluna cromatográfica é fixada no

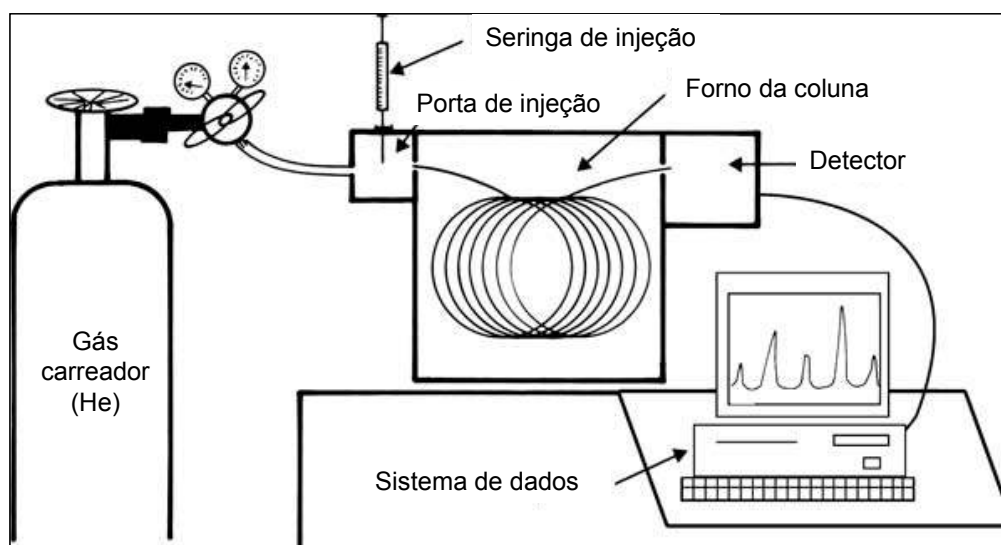


FIGURA 13 – ESQUEMA DE UM SISTEMA CROMATOGRÁFICO
FONTE: KENKEL (2003)

injetor e as amostras são introduzidas na corrente de gás carreador em uma temperatura suficiente para assegurar a vaporização de todos os componentes. Além disso, um detector é fixado diretamente na saída da coluna para monitorar individualmente os componentes da amostra assim que estes eluem da coluna.

A resposta do detector com o tempo forma um cromatograma (figura 14), o qual exibe os dados analíticos para os componentes da mistura. Informação qualitativa é obtida a partir do tempo de retenção característico de cada composto, já a informação quantitativa está contida na área do pico. Um cromatograma também é uma medida valiosa do desempenho e eficiência do sistema cromatográfico que o produziu (KARASEK; CLEMENT, 2003, p. 5-7).

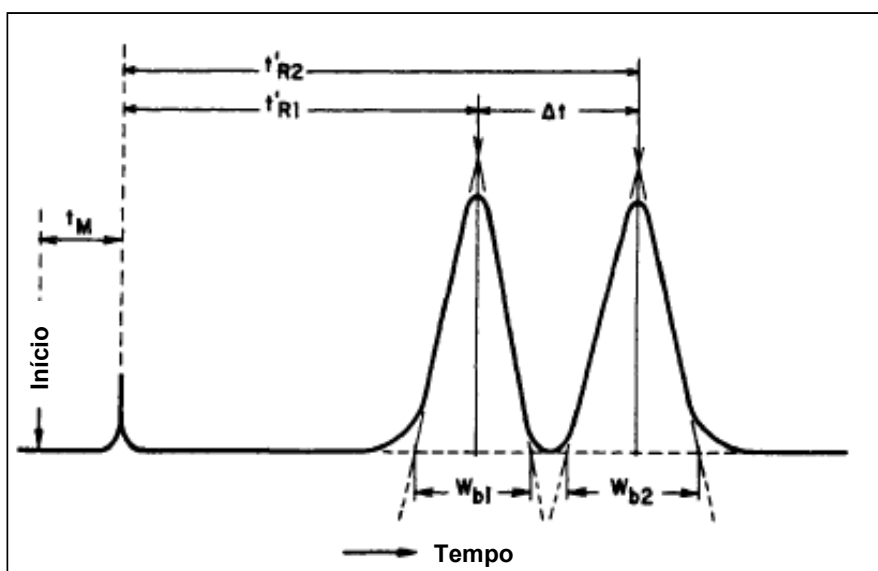


FIGURA 14 – EXEMPLO DE CROMATOGRAMA E PARÂMETROS QUALITATIVOS E QUANTITATIVOS
 FONTE: POOLE (2002)

É desejável que um detector seja universal, e que responda a compostos orgânicos, com baixos limites de detecção, estabilidade, simplicidade de operação e construção, rápida resposta de sinal e excepcional faixa de resposta linear. O detector de ionização de chama (FID - *Flame Ionization Detector*) possui essas características e tornou-se o mais popular em uso. Ademais, somente alguns gases (He, Xe, H₂, N₂), certos óxidos de nitrogênio (N₂O, NO, etc.), compostos contendo um único átomo de carbono ligado a oxigênio ou enxofre (CO₂, CS₂, COS, etc.), gases inorgânicos (NH₃, SO₂, etc.), água e ácido fórmico não fornecem uma resposta significativa.

A resposta do FID (figura 15) resulta da combustão de compostos orgânicos em uma pequena chama difusa de hidrogênio-ar. O mecanismo de produção de íons em chama é complexo e parcialmente compreendido. A temperatura e a composição química da chama não são uniformes e na parte mais quente, uma temperatura de 2000°C é alcançada. Sua resposta é alta para hidrocarbonetos, sendo proporcional ao número de átomos de carbono, enquanto que substâncias contendo oxigênio, nitrogênio, enxofre ou halogênios possuem baixa resposta. Por isso, fatores de resposta podem ser calculados por descritores da química quântica usando modelos quantitativos com relação estrutura / propriedade (tabela 3). Isto simplifica a quantificação de misturas complexas (POOLE, 2002, p. 226-229).

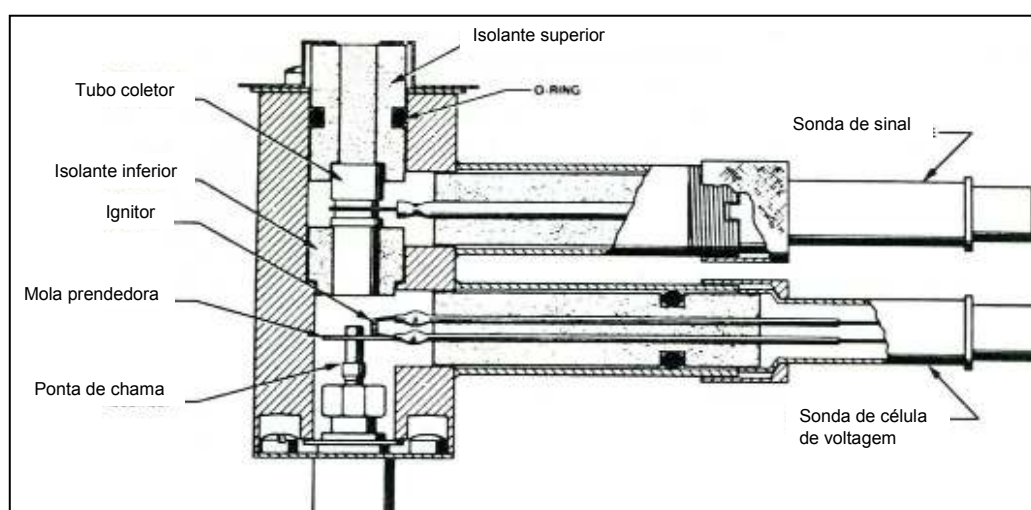


FIGURA 15 – ESQUEMA DE DETECTOR FID
FONTE: POOLE (2002)

TABELA 03 – RESPOSTA AO DETECTOR FID DE DIVERSOS TIPOS DE COMPOSTOS

Átomo	Tipo	Número efetivo de carbono
C	Alifático	1.0
C	Aromático	1.0
C	Olefínico	0.95
C	Acetilênico	1.30
C	Carbonílico	0
C	Carboxílico	0
C	Nitrila	0.3
O	Éter	-1.0
O	Álcool primário	-0.5
O	Álcool secundário	-0.75
O	Álcool terciário	-0.25
N	Em aminas	Similar a O em álcoois
Cl	Em C olefínicos	-0.05
Cl	Em 2 ou mais C alifáticos	-0.12 por Cl

FONTE: POOLE (2002)

3.1.2 Métodos qualitativos

O método mais usual para identificar um composto é a comparação direta entre os tempos de retenção dos compostos desconhecidos com os tempos de retenção de padrões puros (figura 16). Este tipo de comparação é viável para compostos cujos grupos funcionais são conhecidos ou esperados. Outra técnica bastante utilizada é o cálculo do índice de retenção para posterior comparação com bancos de dados específicos.

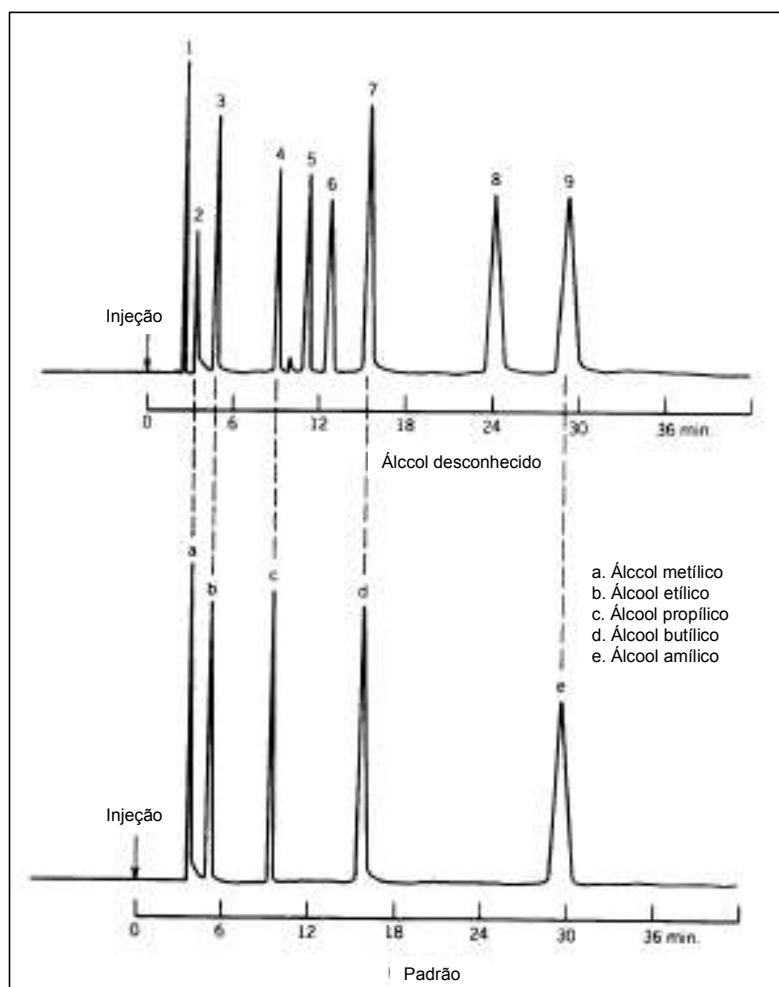


FIGURA 16 – IDENTIFICAÇÃO DE DESCONHECIDOS PELO TEMPO DE RETENÇÃO USANDO PADRÕES
FONTE: POOLE (2002)

O índice de retenção foi proposto pela primeira vez por Kovats em 1958 como um parâmetro para identificar compostos a partir de cromatogramas. O índice de retenção para um dado composto pode ser deduzido a partir de um

cromatograma que possua a mistura do composto e pelo menos dois alcanos lineares que tenham tempos de retenção tais que o composto considerado fique entre os mesmos. Alcanos normais são empregados como padrões, nos quais a escala de índice de retenção se fundamenta. Por definição, o índice de retenção para um alcano normal é igual a 100 vezes o número de carbono do alcano sem considerar o recheio da coluna, temperatura ou outras condições cromatográficas. O índice de retenção para todos aqueles compostos que não sejam alcanos normais, mudam com as variáveis da coluna. Assim, para o heptano, por definição seu índice de retenção é 700, independente do tipo de coluna. Ao contrário, os índices de retenção dos demais compostos podem variar consideravelmente de uma coluna para outra. Pode-se citar como exemplo, o índice de retenção do acenafteno, o qual em fase estacionária de polidimetilsiloxano polimerizado, a 140°C, é 1460, e em polietilenoglicol, passa a ser 2084. Vale a pena salientar que o sistema de índice de retenção tem a vantagem de fundamentar-se em materiais de referência disponíveis facilmente e que cobrem um amplo intervalo de pontos de ebulição. Além disso, a dependência com a temperatura é relativamente pequena (SKOOG; HOLLER; NIEMAN, 2001, p. 776-777).

O índice de retenção linear é uma modificação do índice de Kovats e é aplicável para condições com gradiente de eluição e temperatura: (CIOLA, 1973, p 163-164; LAI e SONG, 1995, p. 1440):

$$R_{lp} = R_{I_1} + (R_{I_2} - R_{I_1}) \times (RT_p - RT_1) / (RT_2 - RT_1) \quad (3.1)$$

Onde:

R_{I_1} = índice de retenção do pico de referência mais próximo eluindo antes de RT_p .

RT_1 = tempo de retenção do pico de referência mais próximo eluindo antes de RT_p .

R_{I_2} = índice de retenção do pico de referência mais próximo eluindo depois de RT_p .

RT_2 = tempo de retenção do pico de referência mais próximo eluindo depois de RT_p .

RT_p = tempo de retenção do pico o qual se quer calcular o índice de retenção.

R_{lp} = índice de retenção do pico desconhecido.

3.1.3 Métodos quantitativos

Dados do cromatograma podem ser usados para obter concentrações relativas dos componentes de uma mistura. A área de pico, obtida a partir da integração do sinal do detector durante a eluição de um componente, é proporcional à quantidade deste componente na amostra. Como a resposta do detector varia de um composto para outro, um conjunto de fatores de resposta precisa ser determinado para uma determinada análise. Existem quatro métodos principais para obtenção de informação quantitativa: normalização de área de pico, padronização interna, padronização externa e adição de padrão (BRAITHWAITE; SMITH, 1999, p. 412-413). Por questões práticas, somente a técnica de normalização de área que é aplicada na quantificação de compostos presentes na gasolina, será abordada.

A porcentagem de área é freqüentemente incluída nos dados básicos impressos de um cromatograma, a qual é obtida a partir de dados brutos calculando-se o total de todas as áreas dos picos, e a contribuição de cada pico:

$$\text{Área para o componente A, } A\%_A = \frac{A_A}{A_{\text{TOTAL}}} \times 100 \quad (3.2)$$

onde: A_A = área de A

$$A_{\text{TOTAL}} = \sum_i^n A_i \quad \text{para n picos} \quad (3.3)$$

A área normalizada é obtida corrigindo-se a área do pico no cromatograma, A_{crom} , de cada componente pela resposta relativa do detector para aquele componente. O fator de resposta (RF) é calculado a partir de um padrão de referência ou padrão interno. A área correta, A_{corr} de cada pico é então usada na equação 3.5 para obtenção da área normalizada (%)(BRAITHWAITE; SMITH, 1999, p. 644):

$$A_{\text{corr}} = \text{RF}_x \times A_{\text{crom}} \quad (3.4)$$

A porcentagem do componente x na amostra é calculado como:

$$\text{Area}\%_{\text{ox}} = \frac{A_{\text{corr}x}}{\sum A_{\text{corr}}} \times 100 \quad (3.5)$$

3.1.4 Cromatografia aplicada à indústria do petróleo

Uma das técnicas analíticas mais exploradas na área de combustíveis para determinação de composição química é a cromatografia. É utilizada desde sua invenção na indústria petrolífera há 40-50 anos atrás, tornando-se uma técnica clássica, consagrada pelo uso. O uso de colunas empacotadas e o detector FID foi amplamente aceito como ferramenta analítica na indústria do petróleo nos anos 60. Consideráveis melhoramentos foram feitos aumentando-se o comprimento da coluna e usando materiais mais uniformes e com pequenos tamanhos de partículas como recheio. As colunas empacotadas puderam permitir que 100 compostos fossem resolvidos em uma corrida, mas ainda representava apenas uma fração do enorme número de compostos presentes no petróleo (BEENS¹, 1998 *apud* BLOMBERG; SCHOENMAKERS; BRINKMAN, 2002, p. 140).

O aumento da complexidade dos processos e produtos levaram ao desenvolvimento de um sistema seletivo de colunas acopladas que ainda é usado na indústria do petróleo de hoje, o analisador PIONA. Boer e van Arkel², em 1971, (*apud* BLOMBERG; SCHOENMAKERS; BRINKMAN, 2002, p. 141) foram os primeiros a descrever um analisador PNA. Seu sistema CG-CG-CG permitia a separação de nafta pesada (até ponto final de ebulição de 200°C) em três classes distintas de compostos, os parafínicos (P), os naftênicos (N) e os aromáticos (A). Este tipo de sistema foi melhorado e o número de passos foi aumentado, resultando

¹ BEENS, J. Ph. D. Thesis, University of Amsterdam, December 7, 1998, Universal Press, Veenendaal, The Netherlands, Ch. 1.

² BOER, H. van ARKEL, P. **Chromatographia**. v. 4, n. 300, 1971.

no analisador PIONA (I para isoparafínicos e O para olefínicos) que é um sistema CG-CG-CG-CG-CG em uso, ainda hoje, em muitas refinarias ao redor do mundo.

Devido a tradição da cromatografia na indústria do petróleo, existem diversas normas internacionais que indicam como quantificar compostos importantes em muitos produtos finais, principalmente a gasolina. A norma ASTM D 4815 (2003) por exemplo, mostra como determinar o teor de álcoois e éteres em gasolinas por cromatografia gasosa e detector FID. A norma ASTM D 5580 (2002) cobre a determinação de benzeno, tolueno, etilbenzeno, xilenos, aromáticos mais pesados e aromáticos totais também em gasolina.

A cromatografia gasosa tende sempre à evolução e simplificação de suas análises, já que o petróleo e seus produtos são considerados como as mais complexas amostras multiclassas dentre outras conhecidas na química analítica. Esta evolução traduz-se em ferramentas analíticas tais como a cromatografia rápida (*fast chromatography*) e a cromatografia bidimensional (GC x GC). A cromatografia rápida utiliza colunas com diâmetro menores que 0.2 mm e promove melhor separação de picos em menos tempo, comparada à cromatografia com colunas capilares normais. Uma típica análise por cromatografia rápida, de uma amostra de gasolina por exemplo, é finalizada em dez minutos.

A cromatografia bidimensional é caracterizada pela combinação seqüencial de duas colunas, tipicamente uma de dimensões convencionais e outra menor capaz de realizar a cromatografia rápida. Uma “sub amostra” representativa do efluente vindo da primeira coluna é direcionada à segunda por um modulador. No sistema de modulação mais amplamente empregado (fundamentado em métodos criogênicos), a modulação entre duas colunas fornece:

- a) compressão da banda cromatográfica eluindo da primeira coluna;
- b) introdução rápida da banda comprimida na segunda coluna.

O resultado disto é um aumento na resolução e na seletividade dos componentes, já que as duas colunas separam os compostos baseando-se em diferentes mecanismos de retenção. Os cromatogramas GC x GC são estruturados de acordo com classes químicas definidas, dentro de um espaço bidimensional de separação. Estas características rendem à técnica uma reputação de extrema utilidade, para análise de matrizes complexas, ou outras amostras que a cromatografia de uma dimensão não seja capaz de separar de um modo aceitável.

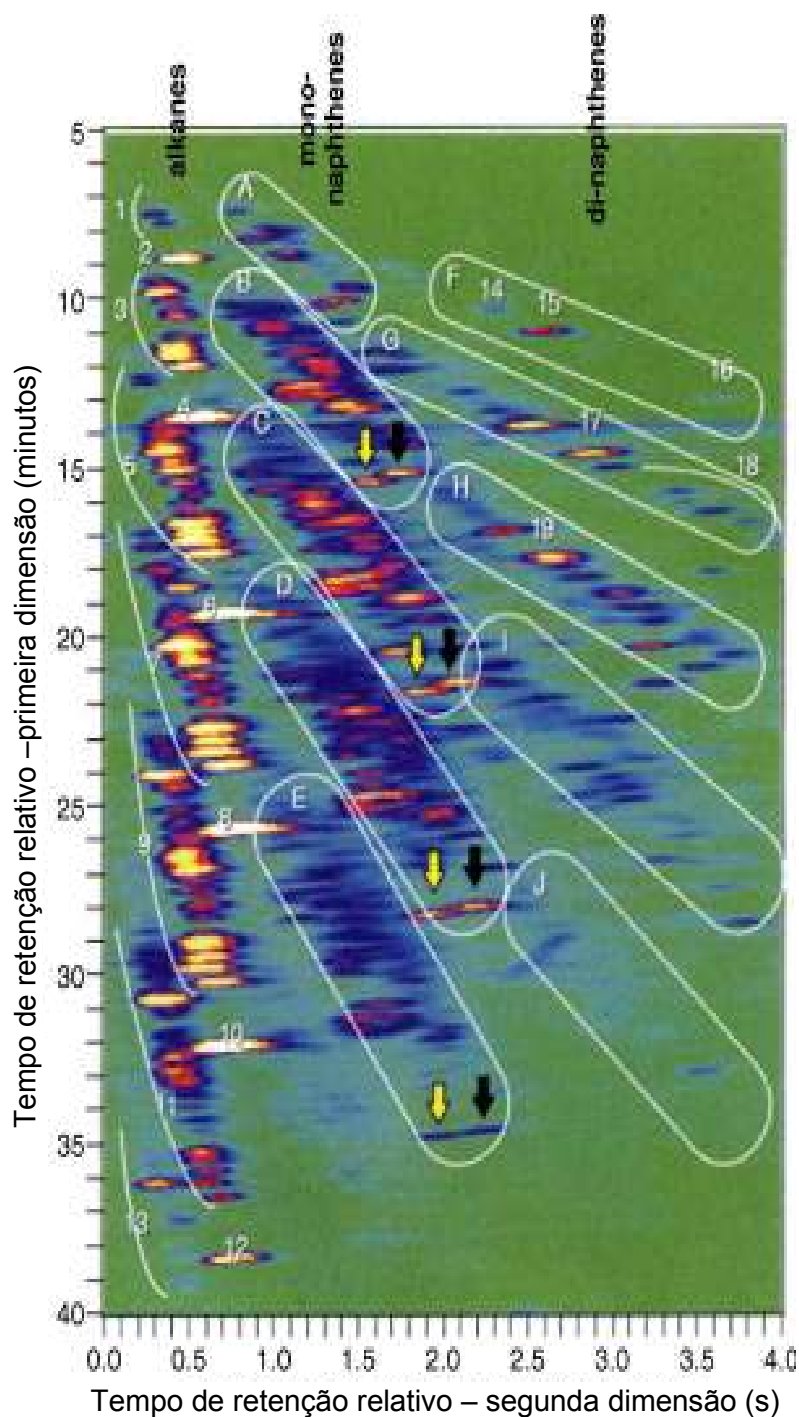


FIGURA 17 – GRÁFICO COLORIDO DE UMA SEPARAÇÃO GC x GC DE UM SOLVENTE NÃO AROMÁTICO
 FONTE: von MÜHLEN *et al.* (2006)

O exemplo de um cromatograma GC x GC está apresentado na figura 17, na qual aparece a separação de um solvente não aromático. Observa-se a separação das seguintes classes de compostos: (1) C₁₀ ramificados; (2) *n*-C₁₀; (3) C₁₁ ramificados; (4) *n*-C₁₁; (5) C₁₂ ramificados; (6) *n*-C₁₂; (7) C₁₃ ramificados; (8) *n*-C₁₃; (9) C₁₄ ramificados; (10) *n*-C₁₄; (11) C₁₅ ramificados; (12) *n*-C₁₅; (13) C₁₆ ramificados;

(14) desconhecidos; (15) (*E*) decalina; (16) (*Z*) decalina; (17) (*E*) metildecalinas; (18) (*Z*) metildecalinas; (19) C₂ decalinas. (A-E) mononaftênicos C₁₀ até C₁₄, no qual a flecha amarela indica os α -alquilciclopentanos e a flecha preta indica os *n*-alquilcicloexanos e (F-J) dinaftênicos C₁₀ até C₁₃.

3.1.5 Composição Química da Gasolina Brasileira

A gasolina é um produto resultante do processo de refino do petróleo. A composição varia conforme a matéria prima, os cortes realizados na coluna de destilação e a mistura com naftas. É uma mistura complexa de hidrocarbonetos com número de carbonos variando de 4 a 12, sendo composta de (ZHU *et al.*, 1999):

- a) alcanos: são os hidrocarbonetos saturados, também conhecidos como parafinas (cadeia linear) e isoparafinas (cadeia ramificada);
- b) ciclanos: são os hidrocarbonetos saturados de cadeia cíclica, também conhecidos como naftênicos;
- c) aromáticos: hidrocarbonetos que possuem o anel benzênico;
- d) alcenos: são os hidrocarbonetos insaturados, também denominados olefinas;
- e) sulfurados: hidrocarbonetos contendo o heteroátomo enxofre;
- f) nitrogenados: compostos contendo o heteroátomo nitrogênio;
- g) oxigenados: compostos contendo o heteroátomo oxigênio. O mais abundante é o álcool etílico anidro adicionado à gasolina, em grandes quantidades (20 – 25% em volume), com a finalidade de reduzir emissões tóxicas e servir como agente antidetonante.

No Brasil existem quatro tipos de gasolina:

- a) Gasolina A – sem adição de álcool. Serve para medições de emissões e consumo, é utilizada em motores CFR (Cooperative Fuel Research) para padronização de funcionamento de máquinas. É a gasolina produzida nas refinarias.
- b) Gasolina C – é a gasolina com adição de álcool etílico. Encontrada nas distribuidoras e postos de combustíveis.

- c) Gasolina Aditivada – é a gasolina comum na qual adiciona-se um aditivo, cuja principal finalidade é limpar o sistema de distribuição de combustível. Também é encontrada nas distribuidoras e postos de combustíveis.
- d) Gasolina Premium ou Podium (alta octanagem) – com adição de álcool. Maior teor de aromáticos e isoparafínicos em relação à gasolina comum.

3.1.6 Análise PIANO: método clássico de análise composicional

Uma análise fundamental para caracterização de gasolina é a análise PIANO, a qual revela a quantidade relativa de hidrocarbonetos (ZHU *et al.*, 1999):

- % n-parafínicos (P)
- % isoparafínicos (I)
- % aromáticos (A)
- % naftênicos (N)
- % olefinas (O)

O uso de cromatografia gasosa, particularmente com multicolumnas para este tipo de análise, tem sido extensivamente investigado (KAPUR; SINGH; SARPAL, 2000). Também um grande número de métodos tem sido descrito na literatura, os quais empregam sistemas com colunas simples ou múltiplas com configurações variadas. Apesar desta configuração de multicolumnas ainda ser bastante utilizada na indústria do petróleo, o programa DHA (*Detailed Hydrocarbon Analysis*) que também faz a análise PIANO foi lançado no mercado internacional. O mesmo utiliza dados gerados por cromatografia gasosa em uma coluna cromatográfica, simplificando a configuração dos equipamentos até então disponíveis para este tipo de análise.

3.1.7 Programa DHA: Detailed Hydrocarbon Analysis

Análise detalhada de hidrocarbonetos (DHA) é um método de análise utilizado para caracterizar várias frações do petróleo e produtos. As amostras são analisadas por cromatografia gasosa, em temperatura programada, em uma coluna capilar de 100 m, de alta resolução, que separa os hidrocarbonetos de acordo com sua

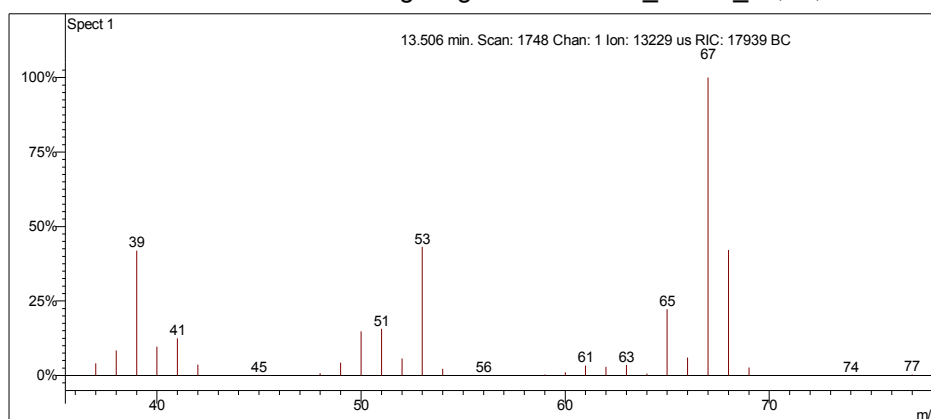
volatilidade relativa. Compostos individuais são identificados por comparação de seus índices de retenção Kovats ou linear em uma biblioteca de compostos, cujo comportamento de eluição foi caracterizado sob condições idênticas. A biblioteca (PIANO library) apresenta 600 compostos catalogados com seus respectivos fatores de resposta e outros dados físico-químicos. As porcentagens mássicas, volumétricas e molares são computadas e reportadas para cada composto. Também são agrupadas e reportadas em parafinas, isoparafinas, aromáticos, naftênicos, olefínicos, oxigenados e compostos com eluição maior que o C14 (STARDHA™, 2000, p. 1).

Como a identificação dos picos é definida pela construção de uma tabela de referência, o usuário deve montar esta tabela de referência após injetar uma mistura de padrões e identificar, por semelhança e ordem de eluição, os mesmos picos de referência encontrados no padrão. Na tabela de referência inicial (com 50 compostos, por exemplo), são preenchidos em campos específicos, o tempo de retenção de cada pico identificado para cada índice de retenção da biblioteca. O programa localiza os tempos de retenção reais desses picos durante a calibração e os utiliza para prever os tempos de retenção e desvios aceitáveis para cada composto da biblioteca PIANO, ou seja, situa todos os compostos da biblioteca nas condições reais de análise. Sendo assim, um pico é identificado como um composto específico se seu tempo de retenção estiver dentro da variação aceitável e tiver o tempo de retenção mais próximo do esperado para o composto. Desta forma o programa DHA identifica corretamente os outros picos situados **entre** os picos de referência (300 compostos).

3.2 Espectrometria de Massas

A espectrometria de massas estuda sistemas que causam a formação de íons gasosos, com ou sem fragmentação, os quais são então caracterizados por suas razões massa/carga (m/z) e abundâncias relativas. Os efeitos de energia de ionização nas moléculas dependem basicamente de reações químicas em fase gasosa nas quais as moléculas são consumidas durante a formação de espécies neutras e iônicas. Embora ocorra o consumo destrutivo da amostra pelo espectrômetro de massa, a técnica é muito sensível e somente traços de material são usados na análise. Um espectrômetro de massa converte moléculas de amostra em íons na fase gasosa, separa-os de acordo com sua razão massa/carga e seqüencialmente grava as intensidades de corrente individuais para cada massa. Estas intensidades de corrente são desenhadas em forma de histograma, utilizando a corrente mais intensa como 100%. Os valores de m/z versus a porcentagem de intensidade relativa são plotados em um diagrama de linha (figura 18) (DOWNARD, 2004, cap.1).

Scan 1748 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 1748, Time: 13.506 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 13.506 min. Scan: 1748 Chan: 1 Ion: 13229 us RIC: 17939 BC
Pair Count: 59 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

FIGURA 18 – ESPECTRO DE MASSAS POR IONIZAÇÃO DE ELÉTRON DO ISOPRENO (2-METILBUTA-1,3-DIENO)

3.2.1 Impacto de Elétrons

Um entendimento da produção de íons torna-se extremamente importante, pois o método usado para ionizar a amostra notadamente afeta o espectro de massas (fragmentação padronizada). Além da ionização por impacto de elétrons (EI – *Electron Impact*) e a foto-ionização, um número diferenciado de métodos é utilizado em espectrometria de massas, incluindo ionização química, ionização por campo, bombardeio atômico rápido, ionização de superfície, eletrospray, ablação a laser e outros métodos de plasma. De longe, o mais utilizado é o impacto de elétron, por sua simplicidade de uso e por ser muito eficaz. O impacto de elétrons envolve a colisão de um elétron com energia suficiente com uma partícula neutra (ou ionizada), com produção subsequente de íon e respectiva ejeção de elétron. O termo impacto de elétron é utilizado de maneira errônea, porque um elétron é pequeno comparado ao tamanho de uma molécula e teria dificuldades em impactar com qualquer parte de um átomo. É melhor entender como um elétron passando perto de um átomo, enquanto em termos de mecânica quântica, a onda do elétron interage e distorce o campo elétrico do sistema atômico (LINDON; TRANTER e HOLMES, 2000). Elétrons passando através de uma câmara de ionização (70 eV) a partir de um filamento para uma “armadilha” (*ion trap*, veja figuras 19 e 20), sob controle de campo magnético, interagem com as moléculas volatilizadas de uma amostra, as quais entram por outro caminho.

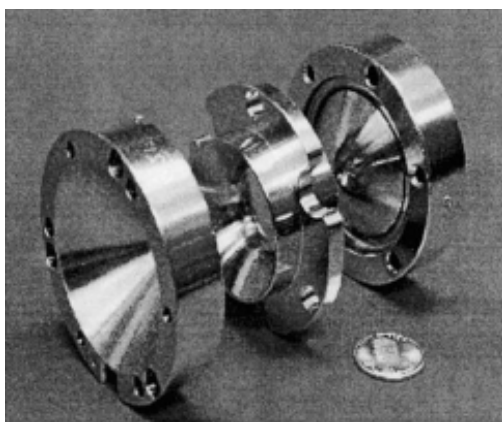


FIGURA 19 – ÍON TRAP DESMONTADO
FONTE: LINDON; TRANTER e HOLMES, (2000)

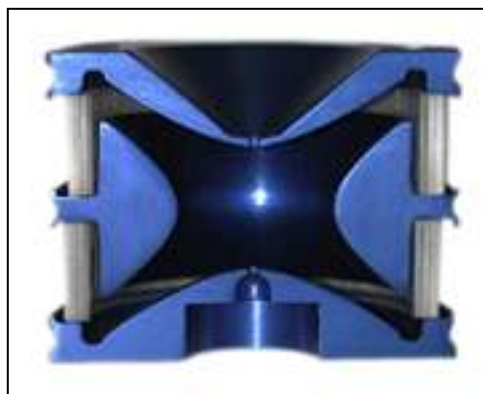


FIGURA 20 – SEÇÃO VERTICAL DE UM ION TRAP
FONTE: VARIAN INC.

A temperatura de volatilização pode variar de ambiente a mais de 400°C em um vácuo da ordem de 10^{-3} Pa. A interação da molécula com o elétron energizado remove um elétron (às vezes dois ou mais) dos orbitais de valência. Durante este processo, um excedente de energia pode ser transferido para a nova forma carregada positivamente formando um íon radical (figura 21):

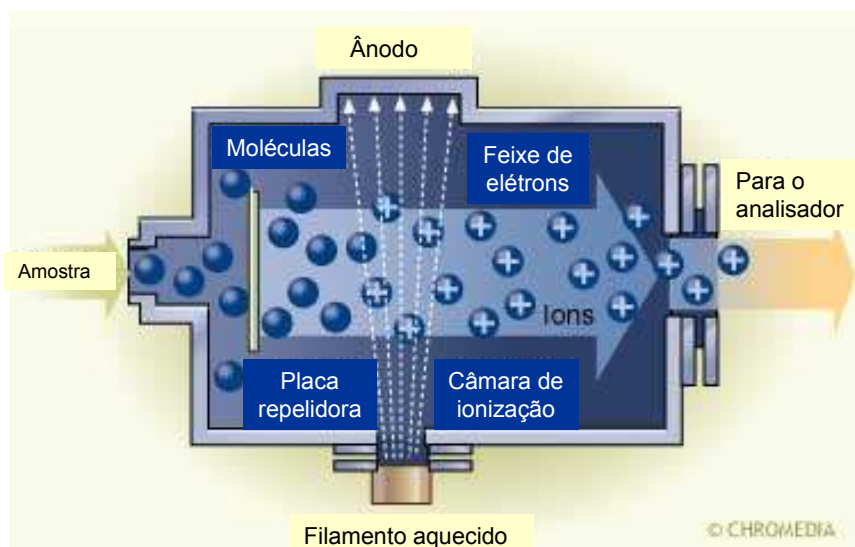


FIGURA 21 – PRINCÍPIO DE IONIZAÇÃO DA TÉCNICA DE IMPACTO DE ELÉTRONS
 FONTE: CHROMEDIA, (2007)

A maioria das moléculas orgânicas são ionizadas com 8 a 12 eV e um adicional de 1 a 6 eV irá dissociar ligações químicas (fragmentação) dentro do íon. A distribuição de energia entre os íons formados e o padrão de fragmentação produzido a partir de diferentes estruturas químicas, depende de diversos fatores, dentre os quais pode-se destacar a facilidade de quebra de ligação e estabilidade do íon gerado, a partir dos quais formam uma base para interpretação qualitativa do espectro de massa (DOWNARD, 2004, cap. 1).

O método para a medida da razão massa/carga em íons confinados foi desenvolvido por Stafford e é conhecido como “modo de instabilidade axial seletiva de massa” (ver esquemas explicativos nas figuras 22 e 23). Este método possibilitou a comercialização do *ion trap* no início dos anos oitenta. Cada espécie iônica é ejetada em uma amplitude específica de RF (radio-freqüência) e, desde que se conheça a amplitude inicial e a razão de subida, a razão massa/carga pode ser determinada para cada uma delas (LINDON; TRANTER e HOLMES, 2000, p. 1001).

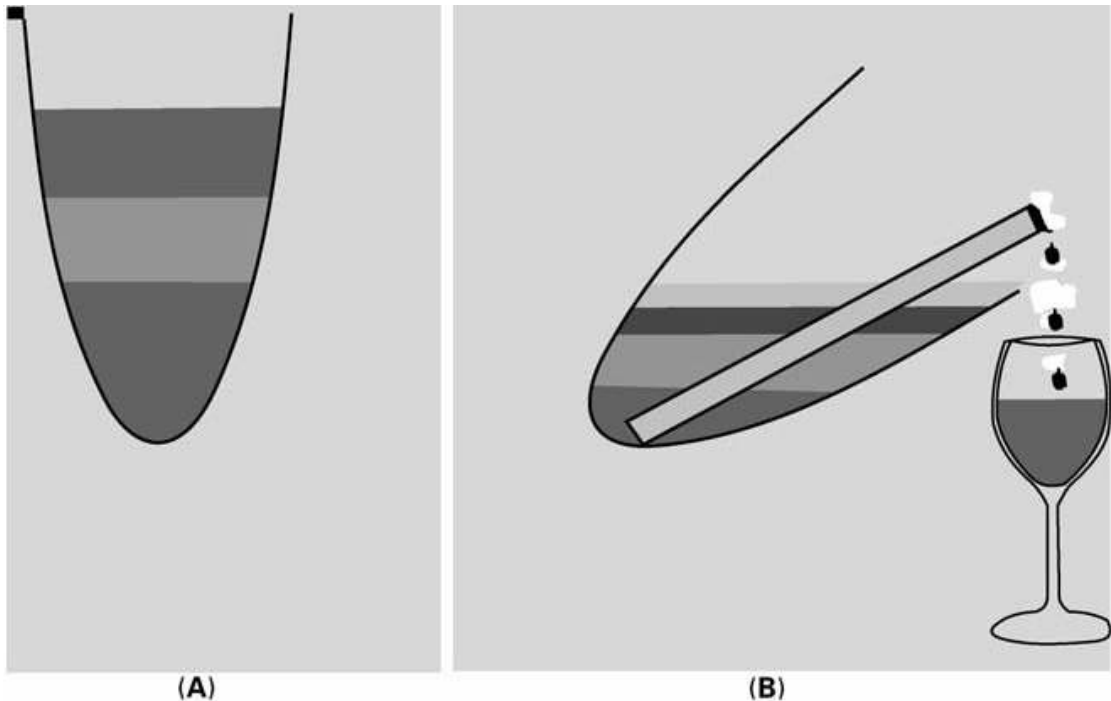


FIGURA 22 – ESQUEMA DE SEPARAÇÃO DOS ÍONS POR RAZÃO MASSA/CARGA
 NOTA: (A) Apresentação esquemática de um potencial parabólico no qual três líquidos diferem na densidade representando as diferenças de razão massa/carga. (B) O gotejamento do líquido corresponde à elevação do potencial de RF enquanto que o canudo, com o qual cada íon é removido por ordem crescente da razão massa/carga, representa a modulação axial.
 FONTE: LINDON; TRANTER e HOLMES, (2000)

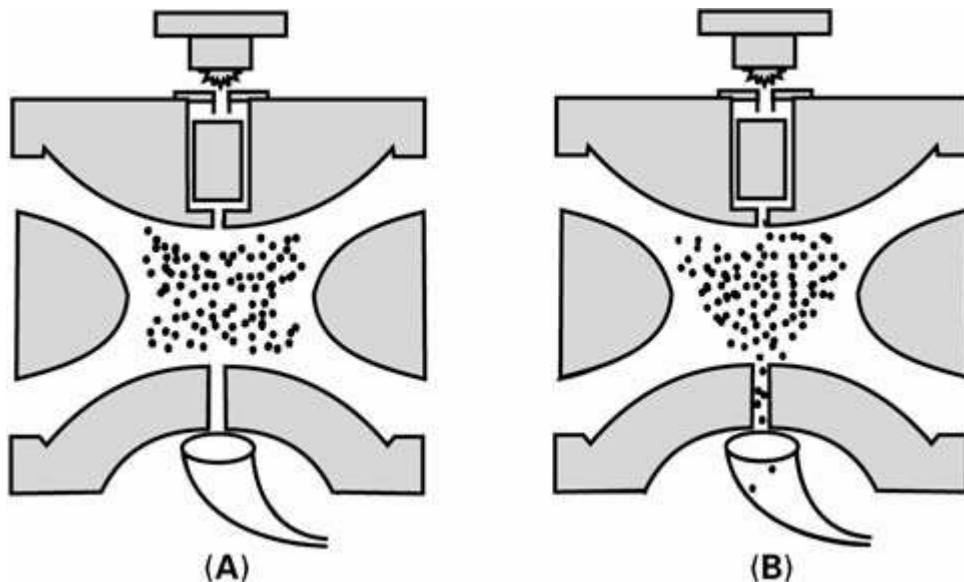


FIGURA 23 – UM OUTRO PONTO DE VISTA DA ESPECTROMETRIA DE MASSAS
 NOTA: (A) Passo 1: uma voltagem de RF é aplicada em 0-30 ms na qual os íons da amostra são formados e armazenados. (B) Passo 2: uma amplitude de RF é elevada no período de 30-85 ms durante o qual ocorre a ejeção seletiva de massa dos íons e a análise.
 FONTE: LINDON; TRANTER e HOLMES, (2000)

Em um trabalho bastante detalhado, Apicella *et al.* (2007) mostram a complexidade da ionização por impacto de elétrons de um composto muito utilizado na gasolina, o MTBE (metil-*terc*-butil-éter), como aditivo antidetonante. Variando-se a energia do elétron entre 25 e 150 eV, a abundância relativa dos íons gerados também varia e, com isto, os autores obtiveram uma grande quantidade de dados para propor decomposições primárias (quebras simples) e secundárias (quebra acompanhada de rearranjos) deste composto.

3.2.2 Ionização Química

Na ionização química, ocorrem reações químicas entre um íon reagente equilibrado termicamente e moléculas de amostra. As condições requeridas são: um grande excesso do reagente, alta energia e conseqüentemente altas pressões. Primeiramente os íons reagentes são formados (primários). Estes íons primários reagem com mais gás reagente e formando cátions secundários reativos, por transferência de hidrogênio. O cátion secundário reage então com as moléculas orgânicas através de quatro mecanismos de reação (GAUGLITZ e VO-DINH, 2003, p. 207):

- a) Transferência de carga: o íon reativo transfere a carga positiva para a molécula, formando o íon molecular M^+ .
- b) Transferência de próton: forma o íon $(M + 1)^+$
- c) Abstração de hidrogênio: forma o íon $(M - 1)^+$
- d) Complexos estabilizados por colisão: formam o íon $(MR)^+$ dependendo do carbocátion gerado em reações intermediárias.

É importante salientar que esta técnica é uma ionização suave que não produz fragmentos e serve para confirmação da massa molecular das substâncias analisadas. Em espectrômetros de massa com armadilha de íons pode-se utilizar facilmente, tanto acetonitrila e metanol, como outros reagentes para a ionização (tabela 6).

TABELA 04 – SUBSTÂNCIAS COMUMENTE UTILIZADAS EM IONIZAÇÃO QUÍMICA.

SUBSTÂNCIA REATIVA	ÍON REATIVO
CH ₄	CH ₅ ⁺
H ₂ O	H ₃ O ⁺
CH ₃ OH	CH ₃ OH ₂ ⁺
C ₂ H ₅ OH	C ₂ H ₅ OH ₂ ⁺
CH ₃ CN	CH ₃ CNH ⁺
NH ₃	NH ₄ ⁺
CH ₃ NH ₂	CH ₃ NH ₃ ⁺

FONTE: GAUGLITZ; VO-DINH, (2003)

3.2.3 Interpretação do Espectro de Massa

A identificação de compostos através do espectro de massas constitui basicamente em se confrontar o espectro obtido com espectros provenientes de banco de dados de substâncias puras. Isto é feito usando-se uma técnica popular de reconhecimento de padrões denominada PBM (Probability Based Matching). Embora esta pesquisa por computador seja conveniente e poderosa, é importante entender como interpretar um espectro de massas, pois o computador compara somente o espectro de um composto desconhecido com espectros de uma biblioteca e oferece uma seleção de compostos que produzem espectros similares. Esta pesquisa por computador é muito útil e torna a interpretação muito mais fácil, mas existem limites. Um simples erro na avaliação dos espectros de massas pode esconder os verdadeiros resultados (VAN BRAMER, 1998, p. 24-25), visto que o espectro do composto desconhecido pode não estar entre as opções fornecidas.

Também pode-se inferir sobre a estrutura química a partir do estudo dos fragmentos gerados. Muitas substâncias são identificadas a partir de regras de fragmentação, as quais são apresentadas a seguir, para as funções químicas existentes na gasolina. Apesar disso deve-se confrontar a substância identificada com um padrão puro, ou utilizar outra técnica de identificação que complemente a técnica, como por exemplo, RMN de hidrogênio ou carbono 13. Em contrapartida, não se pode afirmar que a substância é esta ou aquela, pois existem limitações da técnica tais como a imprecisão na identificação de isômeros óticos ou isômeros de

posição. Sem este tipo de apoio, o que se pode afirmar é que são apenas sugestões de estruturas químicas, aceitas devido a um certo grau de probabilidade.

Dentre as fragmentações mais frequentes para compostos pertencentes à gasolina, destacam-se (HERBERT; JOHNSTONE, 2002, KITSON; LARSEN; McEWEN, 1996; SILVERSTEIN; BASSLER; MORRILL, 1994):

a) Parafínicos:

- Seqüência de fragmentação de 14 u.m. (perda de CH_2).
- Picos mais intensos em C3 e C4.
- Perda de metila é fraco ou inexistente para cadeias longas.
- Primeiro fragmento abaixo do íon molecular é $M - 29$ (significa perda de C_2H_5 do íon molecular).

b) Isoparafínicos:

- Descontinuidade no espectro.
- O último carbono antes da descontinuidade é a ramificação mais longa.
- Apresenta pico $M - 15$ (perda de metila).
- Pico resultante da clivagem de uma ramificação tem tendência a perda de um átomo de hidrogênio.
- Clivagem nos locais mais ramificados com formação de carbocátions mais estáveis.

c) Naftênicos:

- Aumento da intensidade do íon molecular
- Clivagem entre o anel e o restante da molécula.
- Fragmentação do anel: perda de C_2H_4 (28) ou C_2H_5 (29).
- Espectro com maior proporção de íons com massa par.
- Compostos contendo anéis com 6 carbonos fragmentam em m/z 83, 82 e 81 correspondendo à fragmentação do anel com perda de um ou dois átomos de hidrogênio.

d) Aromáticos:

- Apresenta íon molecular estável.
- Presença de pico de massa $m/z = 91$ (íon tropílio).

- Presença de pico de $m/z = 65$ (perda de acetileno do íon tropílio).
- Para grupos alquilas maiores que dois carbonos aparece o pico $m/z = 92$ devido a um rearranjo de hidrogênio, eliminando-se uma molécula neutra de alceno.
- Para monoalquil benzenos aparece um conglomerado de íons m/z 77, 78 e 79.
- Fragmentos característicos com m/z 92, 106, 120 e 148 para alquil benzenos.

e) Olefínicos:

- Íon molecular intenso para compostos de baixa massa molecular.
- Quebras alílicas permitem localizar a dupla ligação.
- A dupla ligação aumenta a abundância de íons da série C_nH_{2n-1} e C_nH_{2n} .
- Fragmentos de íons com m/z 41, 55, 69 e 83 são característicos.

f) Álcoois:

- Picos m/z 31, 45 e 59 indicam composto com oxigênio.
- Pico m/z 31 mais intenso para álcoois primários.
- Perdas características : M-18 (perda de água, desidratação), M-33 (perda de água e metila), M-46 (perda de água e eteno).

A separação dos constituintes de uma mistura complexa, precisa ocorrer antes do detector de massas, utilizando-se um método cromatográfico. Desta maneira identifica-se e quantifica-se cada substância em separado. A espectrometria de massas ou detecção seletiva de massas (nome utilizado para melhorar a propaganda da técnica) pode ser combinada com várias técnicas cromatográficas e, provavelmente, a mais utilizada em aplicações de rotina é a combinação CG-EM (cromatografia gasosa acoplada a espectrometria de massas). Não existem limitações sérias na cromatografia gasosa, tampouco na espectrometria de massas. O uso de colunas capilares de diâmetros pequenos (*small bore*) ou grandes (*large bore*) pode apresentar alguns problemas, relacionados à sensibilidade e ao sistema de vácuo, respectivamente (VÉKEY, 2001, p. 227-228).

A espectrometria de massas é também utilizada para quantificação de grupos funcionais em diversos tipos de combustíveis, e normas internacionais orientam este

processo. Como exemplo, a norma ASTM D 2425 (2004) indica em seu escopo como calcular, para destilados médios (204 a 343°C), a fração volumétrica de aromáticos, alquilbenzenos, naftalenos, parafínicos e naftênicos, através da soma da abundância relativa de fragmentos característicos de cada grupo. A norma ASTM D 2789 (2000) utiliza a mesma seqüência de cálculos para gasolinas com baixo teor de olefínicos (abaixo de 3%).

Outro método, ASTM D 5769 (2004), determina a fração de benzeno, tolueno e outros compostos aromáticos específicos em gasolina comercial, inclusive com presença de constituintes oxigenados, o que não era indicado nas normas acima descritas. Tradicionalmente, a espectrometria de massas é mais aceita para identificação do que para quantificação de constituintes.

Poucos trabalhos foram publicados nos últimos 10 anos, utilizando-se a técnica CG-EM (ou GC-MS, do inglês) com relação aos combustíveis. Vários são muito detalhistas e relacionados a um grupo de substâncias. Por exemplo, SOJÁK *et al.* (2004) calcularam o índice de Kovats de 93 octenos não cíclicos, em dois tipos de fase estacionária (polidimetilsiloxano e esqualano) e identificaram 81 deles em gasolinas de FCC (Fluid Catalytic Cracking). PAVÓN *et al.* (2006b e 2007c) identificaram benzeno (2006b) e metilnaftalenos e naftalenos (2007c) em gasolinas, usando uma nova técnica de injeção, denominada injeção direta, na qual uma coluna cromatográfica atua como um *liner*. O *liner* é um pequeno tubo de quartzo, possuindo diversas formas, utilizado no sistema de injeção cromatográfica. Ele retém substâncias não voláteis do sistema e ajuda na volatilização das substâncias a serem analisadas por cromatografia gasosa. Na técnica de injeção direta, a coluna está em temperatura alta o suficiente para que não ocorra retenção das substâncias em seu interior (240°C nesta aplicação), e as substâncias a serem analisadas são parcialmente separadas. O objetivo disso é ganhar tempo de análise. Como entram muitas substâncias ao mesmo tempo no detector de massas, os autores desenvolveram cálculos específicos para identificar os naftalenos, monitorando somente os íons representativos da classe, que são os íons $m/z = 128$ e 142 . Com isto a análise é realizada em menos de 6 minutos, o que é considerado bastante rápida para uma matriz complexa como a gasolina.

Pavón *et al.* (2004a e 2006b) também desenvolveram técnicas e métodos na área ambiental, analisando óleos crus derramados em solo. Os autores utilizaram a técnica de injeção *headspace* para analisar os hidrocarbonetos mais voláteis

existentes em solos contaminados. O *headspace* é uma técnica na qual a amostra de solo é colocada em recipientes especiais, sendo aquecidas a diversas temperaturas e tempos de aquecimento (98°C por 45 minutos, neste caso). Após o tempo determinado, um sistema de válvulas libera os voláteis acumulados para o sistema CG-EM, e são analisados por cromatografia rápida. Os autores conseguiram identificar os diversos tipos de óleos crus e separá-los em grupos (leves, pesados, etc) aplicando-se ferramentas estatísticas. Isto ocorreu devido a diferenças significativas encontradas na composição e abundância de diferentes tipos de hidrocarbonetos presentes nos 25 óleos estudados.

4 CALIBRAÇÃO MULTIVARIADA

4.1 Quimiometria

A aquisição de dados, principalmente na área de química analítica, atingiu um ponto bastante sofisticado com o interfaceamento de instrumentos aos computadores produzindo uma enorme quantidade de informação, muitas vezes complexa e variada. Uma das características mais interessantes dos modernos instrumentos é o número de variáveis que podem ser medidas em uma única amostra. Um exemplo notável é a intensidade de absorção em mil ou mais comprimentos de onda que é rotineiramente registrada em um único espectro. De posse de tal quantidade de dados, a necessidade de ferramentas novas e mais sofisticadas para tratá-los e extrair informações relevantes cresceu muito rapidamente, dando origem à quimiometria, que é uma área especificamente destinada à análise de dados químicos de natureza multivariada (FERREIRA *et al.*, 1999, p. 724).

O termo quimiometria foi mencionado pela primeira vez em 1971 por Svante Wold³ e Bruce R. Kowalski (*apud* CHAU *et al.*, 2004, p. 5) para descrever o crescimento do uso de modelos matemáticos, princípios de estatística, e outros métodos fundamentados em lógica no campo da química analítica. A quimiometria é um campo interdisciplinar que envolve estatística multivariada, modelagem matemática, ciência da computação e química analítica. As maiores aplicações em algumas áreas da quimiometria incluem: (1) calibração, validação e teste de significância; (2) otimização de medidas químicas e procedimentos experimentais; e (3) a extração do máximo de informação química dos dados analíticos (GEMPERLINE, 2006, p.2).

³ WOLD, S. Chemometrics: What do we mean with it, and what do we want from it? and BROWN, S. D. Has the 'chemometrics revolution' ended? Some views on the past, present and future of chemometrics, Papers on Chemometrics: Philosophy, History and Directions of InCINC '94, Disponível em: <http://www.emsl.pnl.gov:2080/docs/incinc/homepage.html>.

4.2 Calibração Multivariada Linear

Segundo a terminologia da norma ASTM 1655 (1997), calibração multivariada é um processo para criação de um modelo que relaciona concentrações ou propriedades de componentes à absorvância de um conjunto conhecido de amostras de referência, em mais do que um comprimento de onda ou frequência. Apesar desta definição estar restrita a aplicações espectrométricas, muitos autores a utilizam de uma forma mais genérica, na qual diz-se que a calibração multivariada é a atividade de encontrar a relação entre uma ou mais variáveis de resposta \mathbf{y} e um vetor de variáveis preditoras \mathbf{x} :

$$\mathbf{y} = g(\mathbf{x}) \quad (4.1)$$

O vetor \mathbf{x} pode conter espectros, cromatogramas, dados eletroquímicos, coleções de dados univariados (temperatura, pressão, viscosidade, densidade, índice de refração, etc.) A função $g(\cdot)$ é usualmente difícil de encontrar por duas razões: (1) há muitas variáveis em \mathbf{x} , e (2) os dados em \mathbf{x} e \mathbf{y} estão com ruído. Existe um número infinito de funções multivariadas $g(\cdot)$ que podem ser ajustadas a dados com ruído e muitas escolhas de $g(\cdot)$ não possuem significado físico. Por esta razão, tem-se tornado popular o uso de uma aproximação chamado modelo de regressão linear multivariado. O modelo é um polinômio linear (GELADI, 2002):

$$\mathbf{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_kx_k + f \quad (4.2)$$

onde:

b_0 = um *offset*, ou valor de base, referência;

b_k = coeficientes de regressão ($k=1,\dots,K$);

f = um residual.

Os métodos tradicionais de calibração CLS (método clássico de mínimos quadrados) e MLR (regressão linear múltipla), têm suas vantagens e desvantagens quando aplicados a problemas químicos, por exemplo na estimativa de concentrações. Ambos utilizam toda a informação contida na matriz de dados \mathbf{X} para modelar a variável \mathbf{y} concentração, isto é, toda a informação espectral, incluindo informações irrelevantes (fazem pequena remoção de ruído). O CLS (classical least

square) tem como principal problema a necessidade de se conhecer as concentrações de cada espécie espectroscopicamente ativa no conjunto de calibração, o que em geral é impossível nos problemas práticos. Já o método MLR (multiple linear regression) sofre do problema de colinearidade: o número de amostras deve exceder o número de variáveis, que por sua vez devem fornecer predominantemente informação única. Existe neste caso a opção de selecionar um certo número de variáveis que seja menor que o número de amostras e que produzam informação "única", o que pode ser demorado e tedioso. Mais interessante, então, seria a utilização de algum método que, como o CLS, use o espectro inteiro para análise, e como o MLR, requeira somente a concentração do analito de interesse no conjunto de calibração. Dois métodos que preenchem estes requisitos são PCR (Principal Component Regression) e PLS (Partial Least Squares). Estes dois métodos são consideravelmente mais eficientes para lidar com ruídos experimentais, colinearidades e não linearidades. Todas as variáveis relevantes são incluídas nos modelos via PCR ou PLS, o que implica que a calibração pode ser realizada eficientemente mesmo na presença de interferentes, não havendo necessidade do conhecimento do número e natureza dos mesmos (FERREIRA, 1999, p. 726).

O objetivo de ambas as técnicas é desenvolver um modelo matemático representativo do sistema químico e usá-lo para prever propriedades de amostras testes a partir de seus espectros. São próprias para rotinas, determinações rápidas e não destrutivas da composição química ou outra propriedade de interesse, aplicando-se espectroscopia. São simples de utilizar e aplicam-se ao espectro como um todo; portanto não requerem seleção de picos ou linhas de base. São métodos analíticos robustos e devem ser usados quando existem bandas espectrais sobrepostas ou quando são afetadas por variações de linha de base, ruído espectral, impurezas de amostras e respostas não lineares. Também podem detectar erros operacionais, bem como impurezas ou devido à preparação de amostras, indicando que os resultados podem estar incorretos.

O número de dados que podem ser analisados não é fixo, limitado somente pela memória do computador. Um grande número de amostras de calibração pode existir tanto quanto o número de fontes de absorvância presentes na amostra. Tais fontes incluem cada espécie química conhecida, assim como outras fontes de interferência espectral, como interações químicas, óticas e variações na linha de

base. Estas técnicas ignoram qualquer dado que se mantenha constante em todos os padrões e amostras. Também compensam automaticamente as fontes de interferência quando estão presentes nas amostras desconhecidas e de calibração. A concentração é uma medida típica, porém outros atributos podem ser utilizados para estudo. As técnicas estatísticas PCR e PLS são realizadas em três estágios: calibração ou treinamento; validação e otimização; análise de amostras desconhecidas.

Métodos quimiométricos requerem uma calibração ou conjunto de dados para treinamento, para construir um modelo do sistema químico sob investigação. O conjunto de treinamento é usado para gerar o modelo matemático e deve conter informações químicas, físicas ou outras propriedades suficientes do sistema investigado, para que um modelo robusto seja obtido. É necessário que este modelo esteja ajustado aos dados, não os dados ajustados ao modelo. Em aplicações de análise quantitativa, as amostras devem representar a faixa de trabalho de concentrações dos componentes considerados no estudo.

Em resumo, o conjunto de amostras de treinamento deve conter todas as fontes de variância química e tipo de amostra apropriada, para então construir um modelo robusto do sistema, com capacidade de fornecer previsões corretas e precisas das propriedades de interesse de amostras-teste. Os espectros são coletados a partir de um conjunto de amostras, cujas composições químicas são medidas por outro método de referência. Cria-se uma matriz matemática correlacionando-se o espectro à composição conhecida.

Freqüentemente deseja-se modelar sistemas reais e a questão de calibração pode tornar-se muito complexa. Amostras preparadas em laboratório, mesmo aquelas produzidas em escala piloto, quase sempre não contém as mesmas variâncias observadas em amostras de produção. Com isto, um planejamento experimental torna-se obrigatório, de maneira que se podem escolher amostras de calibração a partir de uma população de amostras reais. Existem diversas estratégias para se escolher amostras dentre algumas disponíveis. Se as amostras já estão sendo analisadas por outra técnica, pode-se então escolher amostras que representem o espaço amostral de interesse. Para conjuntos com um número grande de variáveis, analisam-se valores experimentais por Componente Principal, escolhendo-se as amostras a partir de gráficos de variáveis latentes. Caso as amostras ainda não tenham sido analisadas, torna-se caro ou impraticável analisar

todo o conjunto, principalmente se apenas uma fração pode conter a informação relevante para a calibração. Neste caso pode-se utilizar espectros os quais contribuirão para a escolha das amostras, sendo analisados também por Componente Principal. As amostras escolhidas poderão fazer parte do conjunto de calibração para outra técnica de modelagem, fornecendo valores de propriedades de interesse. Por fim, o último teste de um modelo não se fundamenta em como será o comportamento com o conjunto de calibração, mas sim o quanto poderá prever as propriedades de interesse a partir de um conjunto de dados espectrais nunca vistos (GEORGE; WILLIS, 1990).

4.3 Pré-tratamento de dados espectrais

Muitos usuários de programas quimiométricos simplesmente aceitam os resultados dos modelos PLS, PCR e da análise PCA, porém a interpretação dependerá criticamente de como os dados originais foram manipulados. Um pré-processamento de dados ou escalonamento pode ter uma influência significativa (positiva ou negativa) na modelagem, e também relacionar os dados químicos ou físicos, facilitando a análise (BRERETON, 2007, p.160).

As técnicas de pré-tratamentos apresentadas a seguir são apenas algumas dentre muitas técnicas disponíveis para os usuários de espectrômetros IV/UV, as quais ajudam na interpretação qualitativa e quantitativa de espectros.

4.3.1 Subtração de espectros

Esta técnica é executada pela simples subtração do espectro de um componente do sistema do espectro combinado, para que fique somente o espectro do componente de interesse. Se a interação entre os componentes resulta em uma mudança de propriedades espectrais de um ou outro ou ambos os componentes, estas mudanças serão observadas no espectro final. Algumas mudanças podem se manifestar por aparecimento de picos positivos ou negativos no espectro final.

A subtração de espectros pode ser usada em numerosas aplicações, tais como dados de soluções. Para se obter o espectro de uma solução, é necessário gravar o espectro da solução e do solvente sozinho. O espectro do solvente pode então ser subtraído do espectro da solução (figura 24) (STUART, 2004, p 51-57).

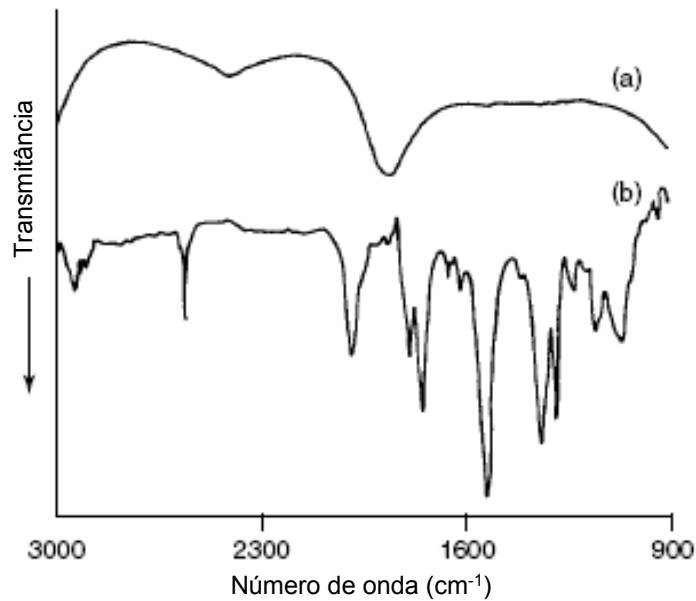


FIGURA 24– ESPECTRO IV DE (a) SOLUÇÃO DE ASPIRINA EM ÁGUA (1 m/v%) E (b) A MESMA SOLUÇÃO APÓS SUBTRAÇÃO DO ESPECTRO DA ÁGUA.
 FONTE: STUART, (2004)

4.3.2 Autoescalamento

Esta técnica é freqüentemente utilizada e também é denominada como padronização (standardisation), porque padroniza as medidas das variáveis. Caso não se utilize esta técnica, as variáveis de maior valor numérico terão maior influência no modelo final.

A técnica consiste em centrar na média cada variável e dividi-la pelo desvio padrão (equação 4.3). Desta forma cada medida terá uma média zero e um desvio padrão igual a 1. Cada variável possui peso igual, porém este método poderá enfatizar variáveis que são puro ruído. Também afeta a dispersão dos dados e a aparência dos gráficos de *loadings* (BRERETON, 2000, p.224; GEMPERLINE, 2006, p.342).

$$x_{i,\text{novo}} = \frac{x_{i,\text{orig}} - \bar{x}_{i,\text{orig}}}{s_{i,\text{orig}}} \quad (4.3)$$

onde:

$x_{i,\text{novo}}$ = nova variável;

$x_{i,\text{orig}}$ = variável original;

$\bar{x}_{i,\text{orig}}$ = média das variáveis originais;

$s_{i,\text{orig}}$ = desvio padrão das variáveis originais;

4.3.3 Derivatização

Esta técnica é muito útil quando existem muitos picos sobrepostos. A figura 25 ilustra o efeito do cálculo da primeira e segunda derivadas de dois picos sobrepostos. A aparência da primeira derivada sugere que o pico não é puro e, neste caso não fornece evidência definitiva de quantos picos existem e quais são as suas posições. A segunda derivada indica claramente que existem dois picos e ajuda a localizar com precisão as suas posições.

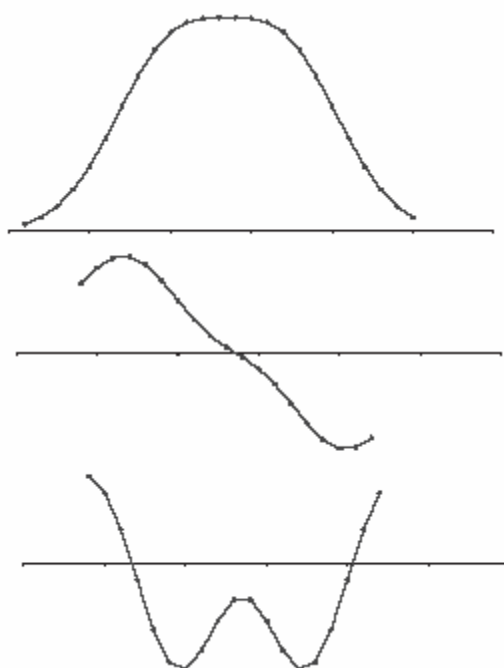


FIGURA 25 – PRIMEIRA E SEGUNDA DERIVADA DE DOIS PICOS SOBREPOSTOS
FONTE: BRERETON, (2007)

É claro que é possível continuar e calcular a terceira, quarta, quinta, etc. derivadas, entretanto, existem duas desvantagens: primeiro, os cálculos são computacionalmente intensos e segundo (e mais importante), amplificam substancialmente o ruído, por isso, seu melhor desempenho acontece quando existe baixa razão sinal/ruído. Estas limitações podem ser superadas usando coeficientes Savitsky-Golay, para melhorar a rapidez no cálculo de altas derivadas. Tabelas de coeficientes têm sido publicadas conforme o tamanho de janela (quantos pontos serão usados para o cálculo da derivada) e o tipo de aproximação requerida (quadrática, cúbica, etc.). Após a derivatização, a suavização dos dados pode ser

executada para obtenção de outra forma otimizada de pico, modificando-se a aparência final do espectro (figura 28) (BRERETON, 2007, p. 138-140).

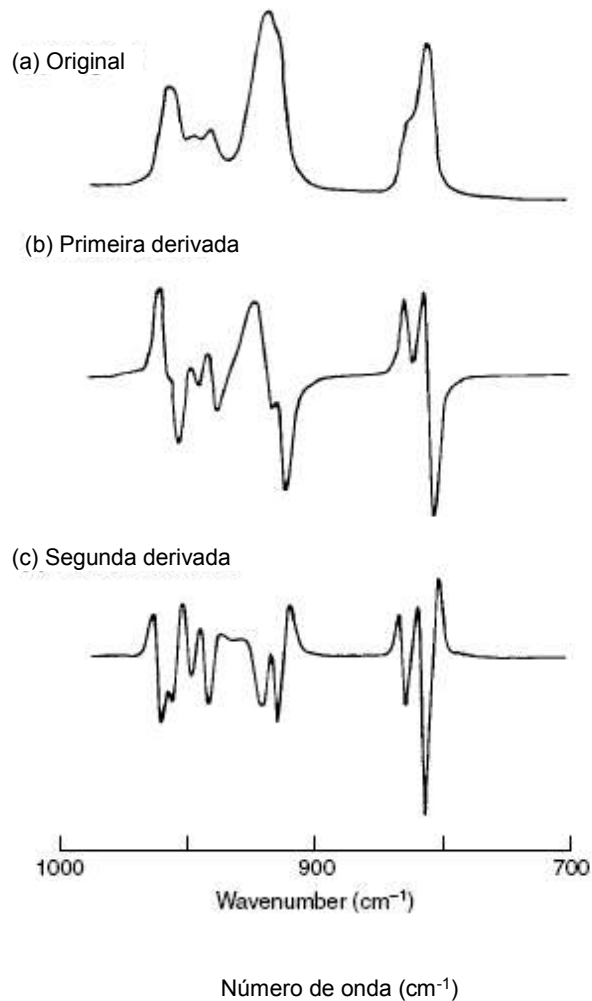


FIGURA 26 – BANDA COMPLEXA DE ABSORÇÃO (a), E SUA CORRESPONDENTE PRIMEIRA (b) E SEGUNDA (c) DERIVADA
FONTE: STUART, (2004)

4.3.4 Suavização (smoothing)

A suavização de dados é uma parte importante da interpretação de extensos conjuntos de dados experimentais, nos quais o sinal é acompanhado de ruído. Embora um número de técnicas de suavização seja conhecido (ex. filtro Gaussiano, transformada de Fourier), métodos empregando deslizamento, e ajuste polinomial têm sido de grande interesse. Uma simples publicação por SAVITZKY E GOLAY (1964), descrevendo o uso de ajuste polinomial por pedaços discretos para

uniformizar dados espaçados foi citada mais de 2000 vezes na literatura científica; a técnica é amplamente utilizada entre os químicos, como uma rotina por si só ou em programas para manipulação de dados (BARAK, 1995, p. 2758).

O método mais simples de suavizar dados flutuantes é através de uma média móvel. Neste procedimento utiliza-se um número fixo de pontos, adiciona-se suas ordenadas e divide-se pelo número de pontos para obter uma ordenada média no centro da abscissa do grupo. Em seguida, o ponto que está no final do grupo é abandonado e o próximo ponto no outro final é adicionado, e o processo se repete (figura 27). Este processo é fundamentado no método de convolução (SAVITZKY; GOLAY, 1964, p.1627). Nesta aproximação, o mínimo quadrado do valor de um dado ponto é calculado e ponderado em combinação do mesmo, mais m pontos em cada lado. Isto corresponde a um movimento ($2m+1$ pontos) no ajuste por mínimos quadrados através dos dados (GORRY, 1990, p. 570).

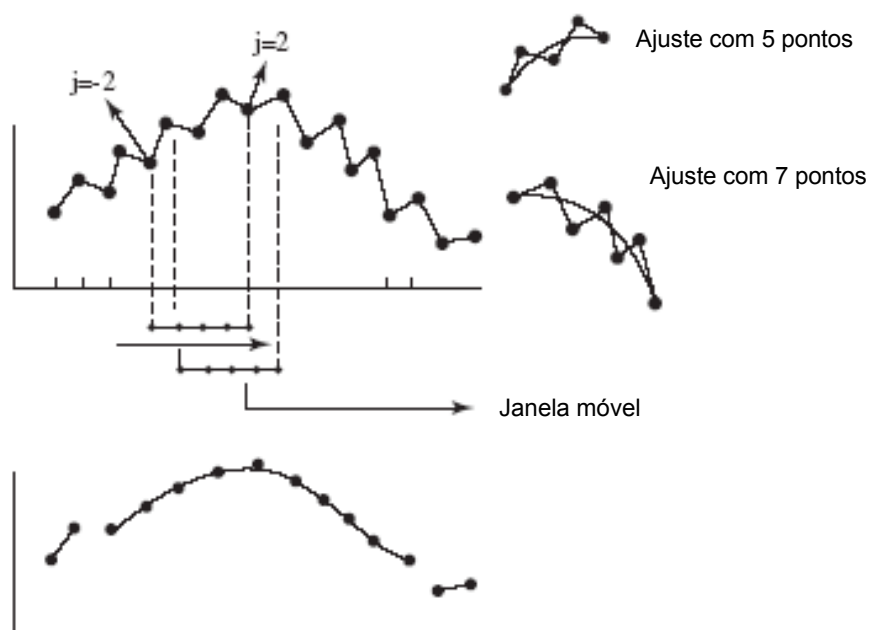


FIGURA 27– O FILTRO SAVITZKY-GOLAY COM UMA JANELA DE $2m + 1 = 5$.
 NOTA: Ao invés de tirar a média dos pontos na janela móvel, usa-se a técnica de ajuste polinomial. No gráfico de cima aparece os sinais originais e no de baixo, os sinais suavizados.
 FONTE: STUART, (2004)

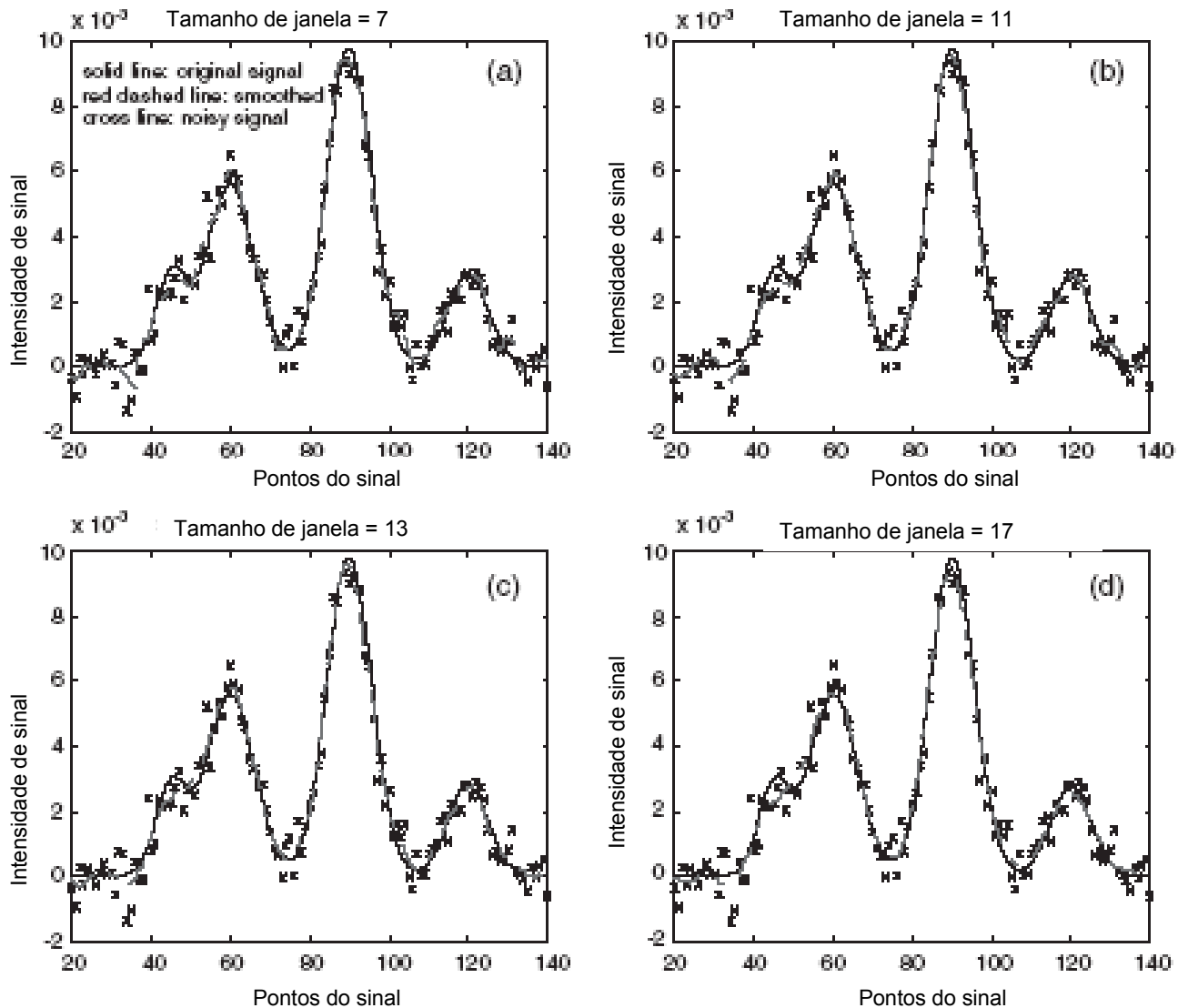


FIGURA 28 – RESULTADOS DA SUAVIZAÇÃO OBTIDA PELO FILTRO SAVITSKY-GOLAY COM DIFERENTES TAMANHOS DE JANELA

NOTA: Representados por quatro gráficos com a curva original (linha sólida), os sinais brutos com ruído (linha cruzada), e a curva suavizada (linha pontilhada).

FONTE: STUART (2004)

Um exemplo usando o filtro Savitsky-Golay para suavizar sinais de ruído analítico é mostrado na figura 28. Os quatro gráficos na figura mostram os sinais com ruído original que foram suavizados pelo filtro Savitsky-Golay com polinômios quadráticos/cúbicos com diferentes tamanhos de janela. O efeito suavizante torna-se mais significativo quando o tamanho da janela aumenta, porém as distorções dos sinais originais tornam-se mais sérias. Neste exemplo, uma janela de tamanho 13 parece fornecer os melhores resultados dentre todos os outros porque o sinal do ruído é menor. Portanto, a escolha do tamanho de janela para o filtro Savitsky-Golay é muito importante (STUART, 2004, p 51-57).

4.3.5 Correção ortogonal de sinal

WOLD *et al.* (1998), apresentaram um método para correção espectral denominado OSC (*orthogonal signal correction*), criado para remover variação sistemática não desejada em dados de espectro, de maneira a melhorar o poder preditivo de modelos de calibração multivariada. Também foi observado que o método diminuía a complexidade dos modelos PLS resultantes e, como consequência, conduzia a uma grande simplificação em termos de interpretação destes modelos.

O OSC é um filtro fundamentado no PLS, o qual utiliza propriedades do algoritmo PLS para encontrar a maior variação nos dados preditores (matriz \mathbf{X}) que seja ortogonal ao vetor resposta (matriz \mathbf{Y}). Isto significa que o algoritmo OSC obtém êxito ao encontrar uma variável latente que descreva a variação em \mathbf{X} com o mínimo de correlação com a resposta \mathbf{Y} .

Pela descrição da variação ortogonal em variáveis latentes, a parte remanescente não explicada pode ser utilizada como dados preditores filtrados, contendo menos informação não correlacionada ao vetor resposta. Desde que somente a variação ortogonal é removida dos dados preditores originais, os dados filtrados constituem uma ótima plataforma para posterior modelagem conforme a complexidade do modelo, habilidade preditiva e interpretação. O método OSC foi desenvolvido como um complemento para pré-tratamentos existentes que retiram variações pertinentes dos dados preditores (WOLD *et al.*, 2001, p. 135-137).

Desde a introdução do método OSC, muitos outros algoritmos OSC foram reportados (FEARN, 2000, PIERNA *et al.*, 2001; BLANCO *et al.*, 2001a; TRYGG; WOLD, 2002; e outros). O algoritmo original OSC é similar ao algoritmo NIPALS (*nonlinear iterative partial least square*), comumente usado em PCA e PLS e pode ser resumido como a seguir (KIM; LEE; LEE, 2005, p.23):

- a) centralizar e escalonar os dados das matrizes \mathbf{X} e \mathbf{Y} ;
- b) calcular o primeiro componente principal (PC1) a partir do PCA de \mathbf{X} e considerar \mathbf{t} como sendo o PC1;
- c) ortogonalizar \mathbf{t} para $\mathbf{Y}:\mathbf{t}_{\text{novo}} = (1 - \mathbf{Y}(\mathbf{Y}^T\mathbf{Y})^{-1}\mathbf{Y}^T)\mathbf{t}$;
- d) calcular o vetor peso PLS, \mathbf{w} , que satisfaça $\mathbf{X}\mathbf{w} = \mathbf{t}_{\text{novo}}$;
- e) calcular um novo vetor score \mathbf{t} de \mathbf{X} e \mathbf{w} : $\mathbf{t} = \mathbf{X}\mathbf{w}$.

- f) repetir os passos **c**, **d** e **e** até que **t** tenha convergido;
- g) computar o vetor *loading* **p**: $\mathbf{p} = \mathbf{X}^T \mathbf{t} / \mathbf{t}^T \mathbf{t}$.
- h) Subtrair a “correção” de **X** para obter os desvios \mathbf{X}_{osc} : $\mathbf{X}_{\text{osc}} = \mathbf{X} - \mathbf{t} \mathbf{p}^T$.

4.4 Regressão Linear Múltipla

O método mais simples de calibração multivariada é a regressão linear múltipla (RLM) ou do inglês multiple linear regression (MLR). Na RLM, a variável a ser prevista para várias amostras (vetor **y**) é estimada por uma combinação linear das variáveis independentes contidas na matriz **X**,

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{b} \quad \text{ou} \quad \mathbf{y} = \mathbf{b}_1\mathbf{x}_1 + \mathbf{b}_2\mathbf{x}_2 + \dots + \mathbf{b}_n\mathbf{x}_n \quad (4.4)$$

onde **b** é o vetor com os coeficientes de regressão. A solução por mínimos quadrados é: $\mathbf{b} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{y}$.

A RLM é o melhor método de calibração para sistemas bem comportados (respostas lineares, sem interferentes, sem interações entre analitos, com baixo ruído e nenhuma colinearidade). Entretanto, a sua limitação está no fato de ela usar toda a informação contida na matriz **X**, não importando se é relevante ou não, para construir o modelo. Com isso, quantidade significativa de variância (informação) irrelevante é incorporada e o modelo se torna pouco robusto, isto é, com pouca habilidade para prever novas amostras. Outro problema está na etapa de inversão da matriz $(\mathbf{X}'\mathbf{X})$. Se a matriz **X** contiver menos linhas que colunas (menos amostras que variáveis), ela não poderá ser invertida e a solução não existirá. Portanto, são necessárias mais amostras do que variáveis. Uma das maneiras de contornar as limitações da RLM é utilizar previamente algum método de seleção das variáveis (POPPI, 1989, p.16-19).

4.5 Análise de Componente Principal

A base fundamental da maioria dos métodos modernos para tratamento de dados multivariados é o PCA (*Principal Component Analysis*), que consiste numa manipulação da matriz de dados com objetivo de representar as variações presentes em muitas variáveis, através de um número menor de "fatores". Constrói-se um novo sistema de eixos (denominados rotineiramente de fatores, componentes principais, variáveis latentes ou ainda autovetores) para representar as amostras, no qual a natureza multivariada dos dados pode ser visualizada em poucas dimensões (FERREIRA, 1999, p. 726).

É um modo de identificar padrões nos dados e expressá-los de maneira que suas similaridades e diferenças sejam evidenciadas. O PCA decompõe a matriz **X** em duas matrizes menores, uma denominada *scores* (**T**) e a outra é a de *loadings* (**P**) (BRERETON, 2000, p. 2133):

$$\mathbf{X} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{P} \quad (4.4)$$

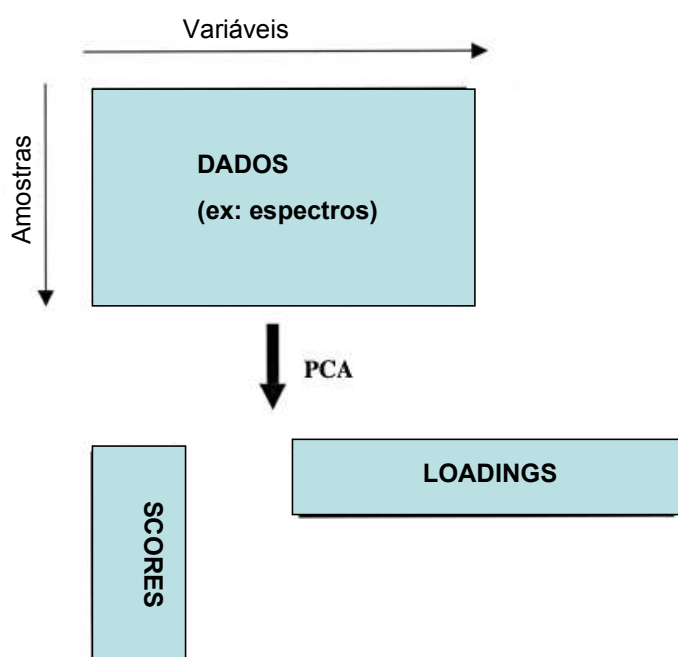


FIGURA 29– PRINCÍPIO DO PCA

A figura 29 ilustra simbolicamente o conceito do PCA. A matriz de *scores* tem as seguintes propriedades:

- a) o número de linhas é igual ao número de linhas da matriz de dados original; usualmente é o número de amostras;

- b) o número de colunas é o número de fatores significantes nos dados, e pode ser qualquer número, de 1 para cima. Idealmente é igual ao número de compostos no conjunto original de dados, porém ruídos e similaridades espectrais combinados distorcem este número. Cada coluna corresponde a um componente principal;
- c) a soma dos quadrados dos elementos de cada coluna da matriz de *scores* está relacionada ao autovalor. Quanto maior é este valor, mais significativo é o componente. Os componentes principais são calculados em ordem de significância.

A matriz de *loadings* tem as seguintes propriedades:

- a) o número de colunas é igual ao número de colunas da matriz de dados original, usualmente é o número de variáveis;
- b) o número de linhas é igual ao número de fatores significativos nos dados. Cada linha corresponde a um componente principal;
- c) a soma do quadrado dos elementos de cada coluna é igual a 1.

Portanto, cada componente principal, \mathbf{a} , é caracterizado por: (1) um vetor *score* \mathbf{t}_a sendo a t -ésima coluna de \mathbf{T} , (2) um vetor *loading* \mathbf{p}_a sendo a p -ésima linha de \mathbf{P} e (3) um autovalor \mathbf{g}_a , que pode ser definido por:

$$\mathbf{g}_a = \sum_{i=1}^I \mathbf{t}_{ia}^2 \quad (4.5)$$

A soma dos autovalores de todos os componentes significativos pode ser igual à soma do quadrado dos dados originais, e nunca maior que este número.

Os componentes principais (CPs) são freqüentemente apresentados geometricamente. O espectro pode ser representado como pontos no espaço J -dimensional onde cada eixo J representa a intensidade a cada comprimento de onda. O primeiro CP pode ser definido como o melhor ajuste em linha reta neste espaço multidimensional. Os *scores* representam a distância ao longo desta linha, e os *loadings* representam o ângulo (direção) da linha reta.

Outra importante propriedade das CPs é a ortogonalidade. Numericamente isto significa que o produto entre quaisquer dois vetores *loadings* ou *scores* é zero:

$$\sum_{i=1}^I \mathbf{t}_{ia} \mathbf{t}_{ib} = 0 \quad \text{e} \quad \sum_{j=1}^I \mathbf{p}_{aj} \mathbf{p}_{bj} = 0 \quad (4.6) \text{ e } (4.7)$$

Alguns autores afirmam que as componentes principais não estão correlacionadas. De um modo estrito, esta propriedade depende do pré-processamento de dados, e somente é verdadeiro se as variáveis foram centralizadas antes do PCA (BRERETON, 2000, p. 2133-2134).

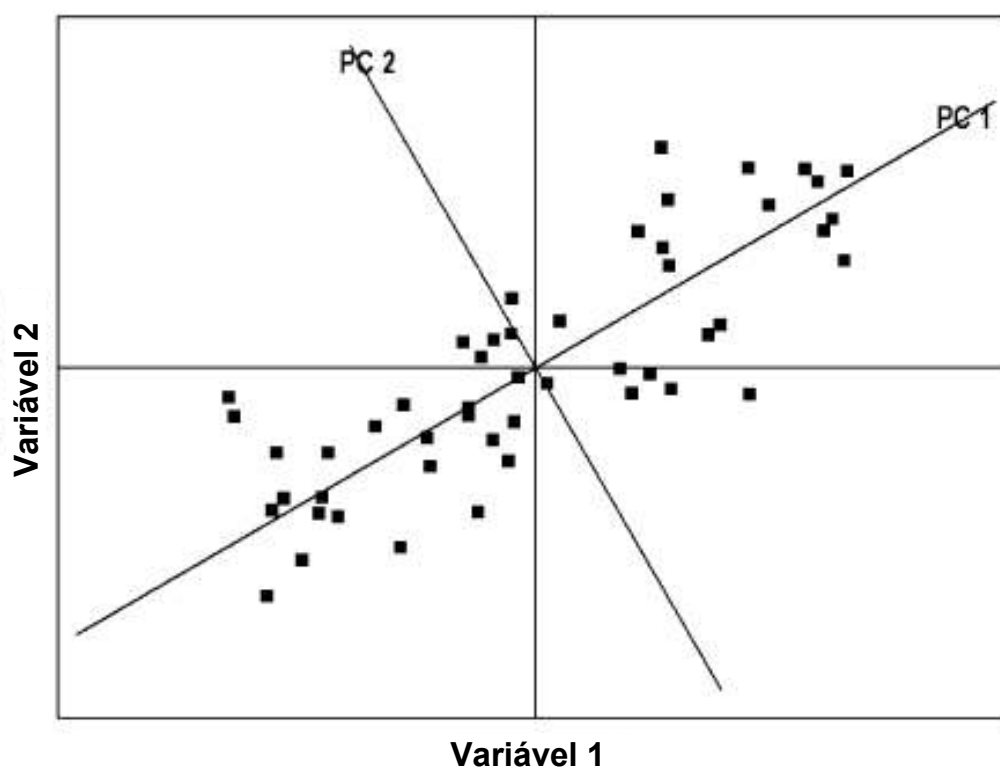


FIGURA 30 – GRÁFICO DE DOIS COMPONENTES PRINCIPAIS, COM OS EIXOS DAS VARIÁVEIS ORIGINAIS 1 E 2
 FONTE: FORINA; LANTERI; CASALE, (2007)

Em resumo, cada componente principal é originada a partir da combinação linear das variáveis originais e formam um novo sistema de eixos que são ortogonais entre si (figura 30). Na prática o PCA atua na redução de variáveis, reduzindo o tamanho original do banco de dados a um conjunto de dados muito menor, que pode ser interpretado mais facilmente na forma de gráficos. Usualmente *scores* estão relacionados com as amostras, enquanto que os *loadings* relacionam-se com as variáveis.

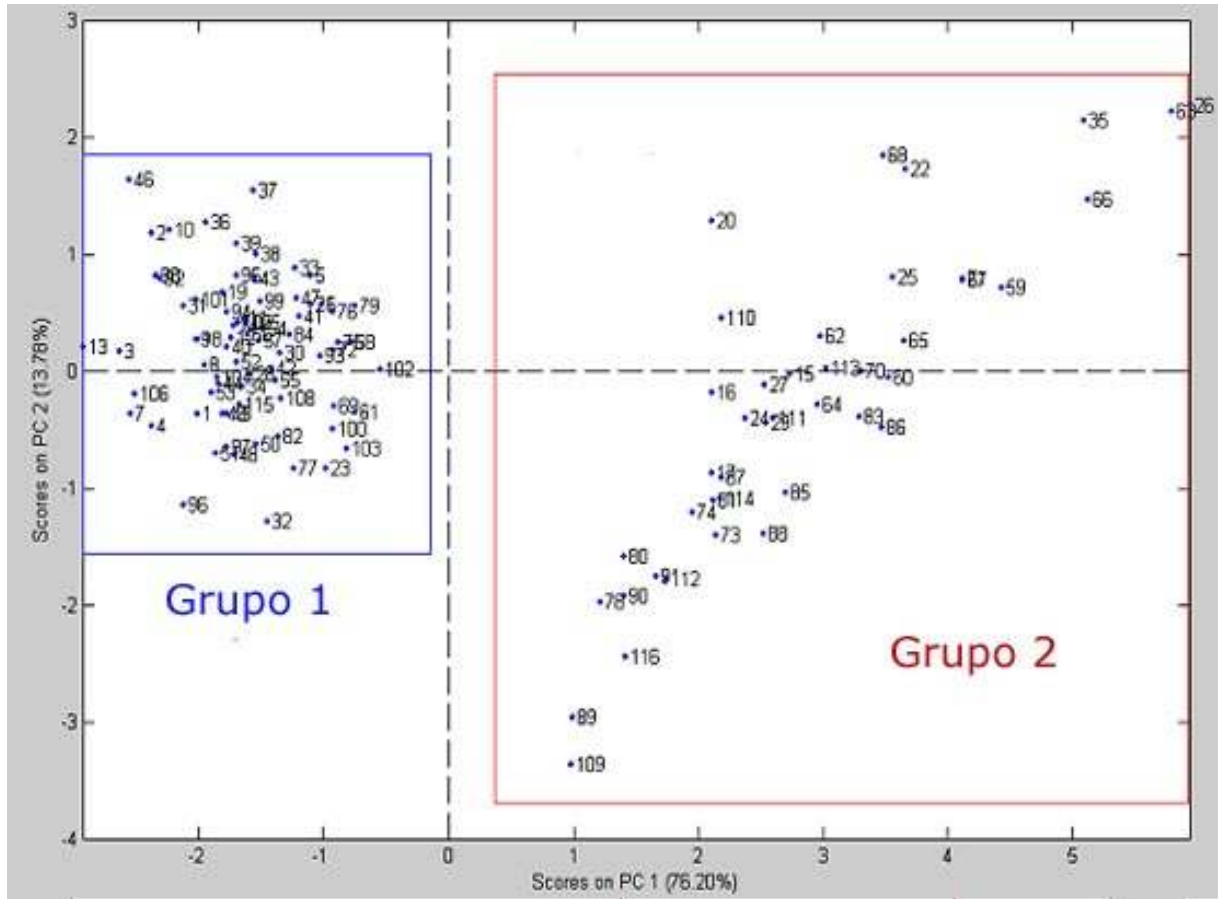


FIGURA 31 – GRÁFICO DE SCORES COM DUAS COMPONENTES PRINCIPAIS DIFERENCIANDO DIESEL DO TIPO B E D.
 FONTE: LACAUT_{ets}, (2007)

No gráfico dos *scores* é fácil observar a presença de grupos e dados considerados como *outliers*, que são amostras atípicas da população analisada (figura 31). Às vezes os conjuntos de dados são muito grandes ou difíceis de interpretar em tabelas ou sob forma de números, e os gráficos das CPs podem simplificar e mostrar as principais tendências, mais fáceis de serem visualizadas.

Entretanto, não somente o gráfico dos *scores*, mas às vezes o gráfico dos *loadings* interessam (figura 32). Aplicando-se exatamente os mesmos princípios no qual o valor dos *loadings* a uma CP pode ser analisada em relação a outra CP. O gráfico dos *loadings* podem fornecer informação detalhada de quais variáveis estão associadas a quais amostras (BRERETON, 2007, p. 149-150). Por exemplo, na figuras 34a e 34b observa-se que a variável 1 influencia as amostras 1,2,3,4,5 e talvez a 7, enquanto que a variável 2 influencia a amostra 6, pelo fato de estarem situadas na mesma região em ambos os gráficos.

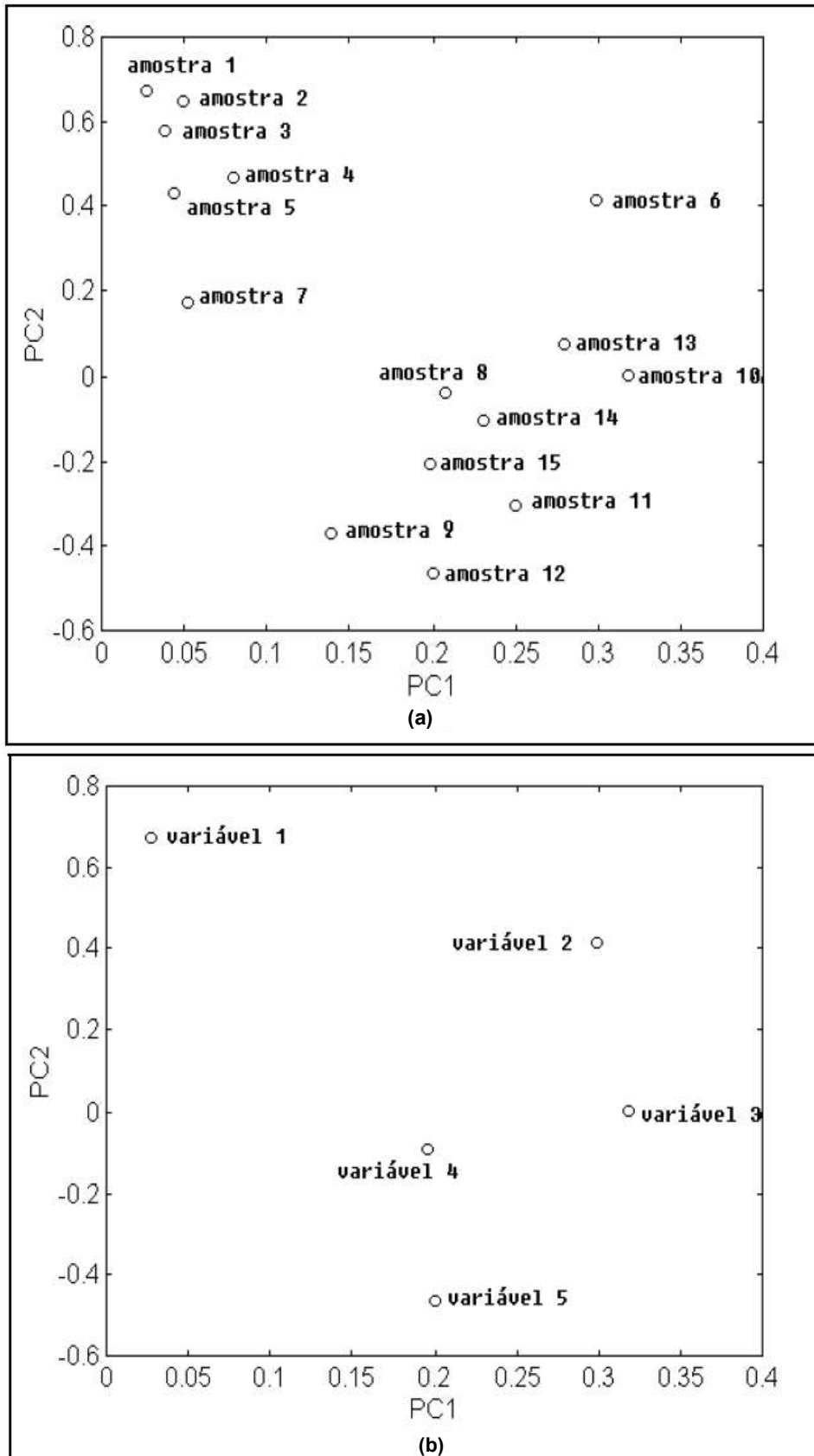


FIGURA 32 – GRÁFICO DE SCORES (a) E LOADINGS (b) PARA DUAS COMPONENTES PRINCIPAIS

FONTE: RIBEIRO, (2001)

4.6 Regressão do Componente Principal

O PCR (*Principal Component Regression*) usa a regressão (às vezes chamado de transformação ou rotação) para converter os *scores* (T) das CPs em concentração (figura 33). É bastante utilizado em espectroscopia de misturas e muito útil quando somente alguns compostos estão identificados.

Se c_n é um vetor contendo a concentração conhecida de n compostos nos espectros (matriz Y), então os *scores* das CPs podem ser relacionadas a seguir:

$$c_n \approx T \cdot r_n \quad (4.8)$$

onde r_n é um vetor coluna cujo comprimento é igual ao número de CPs calculados. Idealmente o comprimento de r_n poderia ser igual ao número de compostos na mistura. O vetor pode ser obtido usando a pseudo-inversa de T ,

$$r_n = (T' \cdot T)^{-1} \cdot T' \cdot c_n \quad (4.9)$$

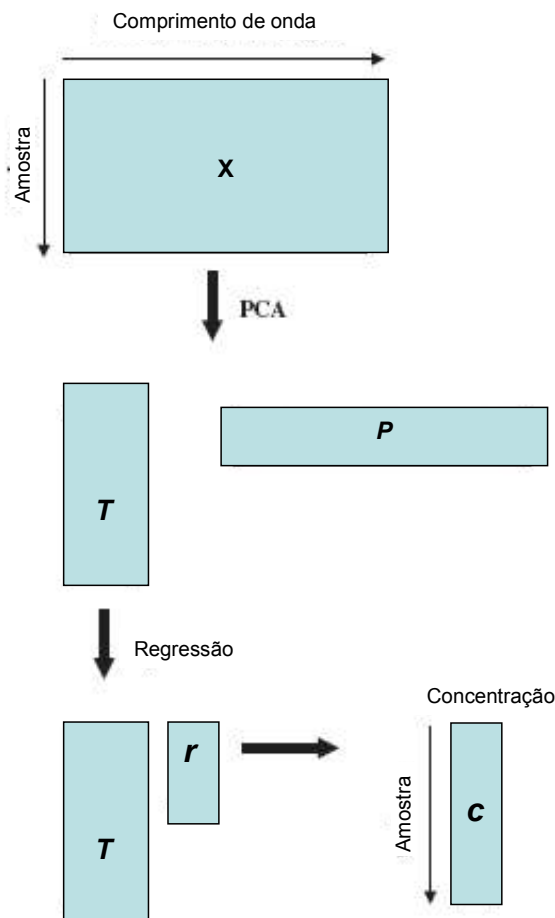


FIGURA 33 – ESQUEMA DA REGRESSÃO DE COMPONENTES PRINCIPAIS

Na prática, o número de compostos em misturas não é sempre conhecido. Em misturas naturais complexas pode ser impossível determinar quantos compostos significativos estão presentes e, mesmo que se conheça o número de CPs, freqüentemente o número é muito menor que o verdadeiro número de compostos, devido à similaridade espectral, ruído, colinearidades, e assim por diante. Portanto, o número das colunas em T pode variar. Quanto maior o número de CPs forem empregados para formar o modelo, mais próximos estarão dos valores que se deseja modelar (BRERETON, 2000, p. 2134).

4.7 Regressão dos Mínimos Quadrados Parciais

O PLS (*Partial Least Squares*) ou PLSR (*Partial Least Squares Regression*) possui uma longa e venerada história nos anais da quimiometria. Esta técnica foi proposta originalmente pelo estatístico sueco Herman Wold, cujos interesses primários estavam na previsão econômica. Nos anos de 1960 seu filho, Svante Wold, juntamente com um número de cientistas escandinavos, defenderam seu uso na química. Possivelmente nenhuma técnica em quimiometria é alvo de tanta controvérsia, com alguns grupos defendendo o uso do PLS para quase tudo (inclusive classificação) e outros grupos que concordam que o PLS é útil, mas é uma dentre muitas técnicas da quimiometria. Em muitas áreas a calibração com PCR serve quase para o mesmo propósito, entretanto, apesar do PLS ter sido o assunto de muitos artigos, mais do que qualquer outra técnica quimiométrica, existe um grande número de fiéis que resolveram a maior parte dos problemas, com muito sucesso, por PLS.

Um princípio importante do PLS é que a modelagem da informação da concentração (matriz Y) é tão importante quanto a modelagem da informação da matriz X . Na modelagem por PCR, os CPs são calculados exclusivamente a partir da matriz X , e não levam em consideração a matriz Y . No PLS, os componentes são obtidos usando ambas as matrizes simultaneamente. Estatísticos gostam de pensar sobre a maximização da covariância (entre duas matrizes) como oposto à variância (para a matriz X como acontece no PCA). Os tratamentos mais convencionais dos mínimos quadrados envolvem encontrar uma variável que maximiza o valor de X^2 , ou o quadrado dos dados experimentais modelados. O PLS encontra uma variável que maximiza o produto dos dados experimentais (X) com as concentrações (Y)

freqüentemente chamado de covariância. Em termos físicos o PLS assume que existem erros em ambas as matrizes, os quais são de igual importância. Isto faz algum sentido: as concentrações usadas na calibração são sujeitas a erros (ex.: diluição e pesagem) assim como os espectros e cromatogramas. Existem muitas maneiras de expressar este fato e uma conveniente pode ser:

$$\mathbf{X} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{P} + \mathbf{E} \quad (4.10)$$

$$\mathbf{c} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{q} + \mathbf{f} \quad (4.11)$$

como ilustrado na figura 36. \mathbf{X} representa as medidas experimentais (ex. espectros) e \mathbf{c} as concentrações. A primeira equação acima parece similar àquela do PCA, porém a matriz de *scores* (\mathbf{T}) também modela as concentrações, e o vetor \mathbf{q} possui alguma analogia ao vetor de *loadings*. O termo *scores* está relacionado com a classificação das amostras, e os *loadings* relacionam-se com as variáveis. É importante salientar que não existe tradução para o português destes termos técnicos para o português, sendo muito utilizados tanto em artigos internacionais, quanto em nacionais.

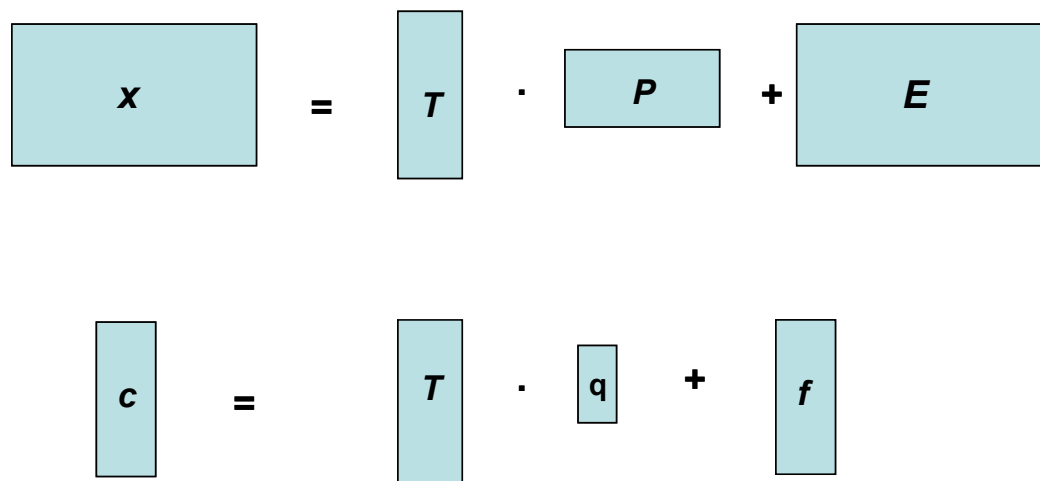


FIGURA 34 – PRINCÍPIOS DO PLS

A matriz \mathbf{T} é comum em ambas as equações. \mathbf{E} é a matriz de erros para a matriz \mathbf{X} e \mathbf{f} é um vetor dos erros da matriz \mathbf{c} . Os *scores* são ortogonais, mas os *loadings* (\mathbf{P}) não são, diferente do PCA, e usualmente não estão normalizados. Existem vários algoritmos para o PLS, e em muitos os *loadings* também não são normalizados (BRERETON, 2007, p. 211-212).

Uma maneira mais simples de interpretar o PLS é que ele forma novas variáveis \mathbf{x} (estimativa de variáveis latentes), através da combinação linear das antigas variáveis e usa esta matriz como preditora de \mathbf{y} (WOLD; SJÖSTRÖM; ERIKSSON, 2001, p. 114). Estas variáveis latentes são na realidade combinações lineares das componentes principais calculadas pelo método PCR. Há vários algoritmos para calcular a decomposição usada em PLS. Os dois mais populares são NIPALS e SVD (FERREIRA, 1999, p. 727).

4.8 Validação Cruzada

A validação cruzada (do inglês *cross-validation*) é uma metodologia utilizada para a escolha do número de componentes principais baseada na avaliação da magnitude dos erros de previsão de um dado modelo de calibração. Esta avaliação é feita pela comparação das previsões das concentrações previamente conhecidas ($c_i \ i = 1:n$) e, em resumo, consiste do seguinte:

- a) remove-se uma ou mais amostras i do conjunto de calibração e constrói-se o modelo como anteriormente;
- b) usa-se o novo modelo para prever os dados removidos \hat{c}_i ;
- c) calcula-se o erro de previsão ($c_i - \hat{c}_i$); (4.12)
- d) calcula-se a soma dos quadrados dos erros de previsão:

$$\text{PRESS} = \sum_i (c_i - \hat{c}_i)^2 \quad (4.13)$$

- e) ou a raiz quadrada RMSEP, que é na realidade um desvio padrão

$$\text{RMSEP} = \sqrt{\frac{\sum_i (c_i - \hat{c}_i)^2}{n}} \quad (4.14)$$

onde n é o número de amostras do conjunto de calibração.

O processo é repetido para modelos com uma, duas componentes principais (e assim por diante). Para cada sistema em estudo, o número mais adequado de fatores, k , será o correspondente ao menor valor de PRESS (FERREIRA, 1999, p. 727-728).

4.9 Pós Modelagem

Um dos maiores problemas na área de calibração multivariada é determinar como efetivamente está o modelo quimiométrico. O principal objetivo de um modelo é usar uma função matemática para prever parâmetros como a concentração. No PCR e PLS temos que escolher quantos componentes devemos reter no modelo, os quais representam uma das dimensões das matrizes de *scores* e *loadings*. O tamanho destas matrizes influenciam a qualidade das previsões.

Conforme o número de componentes aumenta, o erro de previsão do conjunto de calibração ou treino é reduzido. Por exemplo, se apenas uma componente é usada no modelo, haverá um erro de 50%, porém se 5 componentes forem utilizadas o erro pode diminuir para 10%, e para 10 componentes o erro pode ser 1%. Usualmente a raiz quadrada dos erros de previsão (RMSEP - *root mean square error prediction*) entre os dados conhecidos e previstos é calculado. Em muitos casos não há conhecimento de quantas componentes deverão ser retidas. Em misturas complexas, freqüentemente é impossível determinar o número de compostos significativos em uma série de espectros, então uma aproximação usual é verificar como os erros diminuem com o aumento das componentes. Às vezes é suficiente selecionar o número ótimo de componentes de acordo com um critério de porcentagem, por exemplo, 1%. Se oito componentes dão um erro de 1,7% e nove, 0,6%, escolhe-se nove componentes. Um aparente dilema é que quanto mais componentes principais são empregados, melhor é a previsão. Porque não selecionar 15 ou até 20 componentes? Os dados apresentarão, aparentemente, modelagem perfeita. O problema é que as últimas componentes modelam primariamente o ruído (BRERETON, 2007, p. 211).

É, geralmente, uma boa idéia testar o modelo com um conjunto de amostras totalmente independentes. A figura 35 compara os erros de treinamento, validação cruzada e um conjunto independente para um modelo típico (teste). Os erros de treinamento são reduzidos como esperado, os erros de validação cruzada alcançam um mínimo após 10 componentes e os erros do conjunto independente estão sempre altos. Isto sugere que o conjunto independente tem características muito diferentes do conjunto de treino. Às vezes não se quer um modelo de grande abrangência e, portanto, esse assunto não tem relevância. Caso contrário, o conjunto de calibração deverá ser revisado.

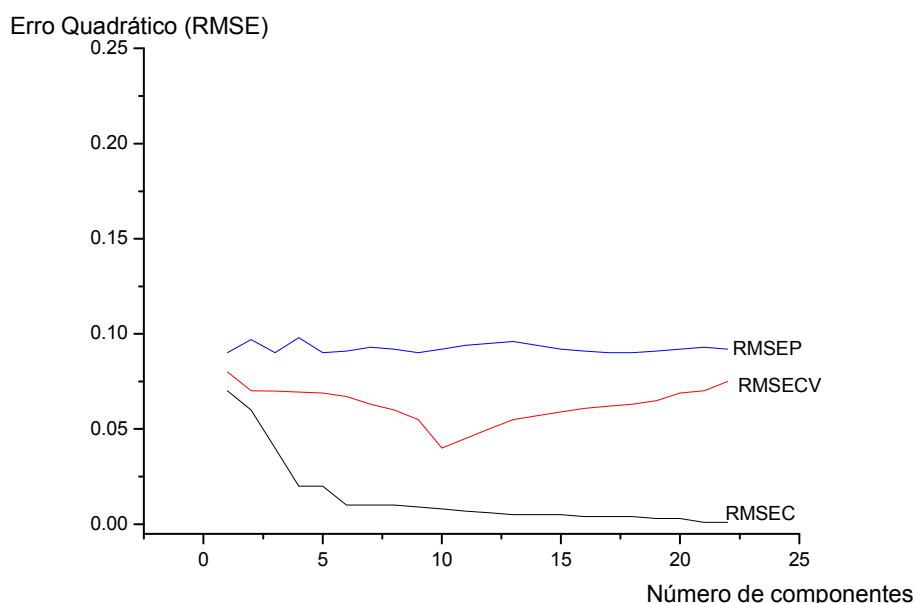


FIGURA 35 – ERROS DE TREINAMENTO, VALIDAÇÃO CRUZADA E CONJUNTO DE TESTE

Um objetivo real poderá ser a análise de uma amostra estranha que ocorre em um processo que não funciona de acordo com os padrões normais. Este desvio particular do normal pode nunca ter ocorrido antes e não deve, portanto, fazer parte do conjunto original de calibração. Nemo treinamento, tampouco a validação cruzada, estarão aptas a guiar o quimiometrista na qualidade do modelo. Por esta razão existe muito interesse na detecção de *outliers* (amostras anômalas), envolvendo a detecção de amostras cujos espectros são incompatíveis com o conjunto de calibração original (BRERETON, 2007, p. 211-212).

4.9.1 Verificação de amostras anômalas

A detecção de amostras anômalas (*outliers*) é tão importante quanto a determinação do número de componentes principais que serão empregadas no modelo. Ao verificar a qualidade do conjunto de calibração, deve-se assegurar de que as amostras formam um conjunto homogêneo, removendo-se aquelas amostras que são solitárias. Para a detecção de *outliers*, usa-se duas grandezas complementares: *leverage* e resíduos de *Student*. Os termos *outlier* e *leverage* também são apresentados tradicionalmente no idioma inglês.

A *leverage* (contribuição) é uma medida da influência de uma amostra no modelo de regressão. Um valor de *leverage* pequeno indica que a amostra em questão influencia pouco na construção do modelo de calibração. Por outro lado, se as medidas experimentais de uma amostra são diferentes das outras do conjunto de calibração, ela provavelmente terá uma alta influência no modelo, que pode ser negativa. Em geral, estas amostras solitárias estão visíveis no gráfico de *scores*. A *leverage* pode ser interpretada geometricamente como a distância de uma amostra ao centróide do conjunto de dados e é calculada segundo a equação

$$h_{ii} = \frac{1}{n} + (\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})^t (\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} (\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}}) \quad (4.15)$$

onde \mathbf{x}_i é o espectro da *i*ésima amostra, $\bar{\mathbf{x}}$ é o espectro médio e $\mathbf{X}^t \mathbf{X}$ é a matriz de variância-covariância. Pela expressão acima, vê-se claramente que a *leverage* (h_{ii}) é uma função da distância da amostra à média e das correlações entre as variáveis.

Outra maneira bastante simples de se calcular *leverage* é medindo a distância de uma amostra ao centro do conjunto através do cálculo da distância Euclideana no espaço das componentes principais

$$\mathbf{H} = \mathbf{T} \mathbf{T}^t \quad (4.16)$$

onde \mathbf{T} é a matriz dos *scores*. Os elementos da diagonal de \mathbf{H} , h_{ii} , estão diretamente relacionados com os valores da *leverage*.

Existe uma regra prática que permite distinguir amostras anômalas: as amostras com $h_{ij} > h_{crit}$, que são consideradas suspeitas e devem ser analisadas caso a caso. Aqui, n é o número de amostras do conjunto de calibração e k é o número de componentes principais ou variáveis latentes.

$$h_{crit} = \frac{3k}{n} \quad (4.17)$$

É interessante, ainda, analisar os resíduos das concentrações que são calculados, por exemplo, por validação cruzada. Amostras mal modeladas têm resíduos altos. Para obter a influência de cada amostra em particular, tem-se o resíduo de Student, que, para a amostra i , é dado como

$$L_{resc_i} = \sqrt{\frac{(c - c_i)^2}{(n-1)(\hat{1} - h_i)}} \quad (4.18)$$

$$\text{Resíduo de Student}_i = \frac{(c - c_i)}{L_{resc} \sqrt{\hat{1} - h_i}} \quad (4.19)$$

onde L_{resc_i} é o resíduo da concentração da amostra i corrigido pela *leverage* (FERREIRA, 1999. p. 728).

Supondo-se que os resíduos de Student são normalmente distribuídos pode-se aplicar um teste t como indicativo para verificar se a amostra está ou não dentro da distribuição com um nível de confiança de 95%. Como os resíduos de *Student* são definidos em unidades de desvio padrão do valor médio, os valores além de $\pm 2,5$ são considerados altos sob as condições usuais da estatística.

A análise do gráfico dos resíduos de *Student* versus *leverage* para cada amostra é a melhor maneira de se determinar as amostras anômalas. Amostras com altos resíduos mas com pequena *leverage* provavelmente têm algum erro no valor da concentração, que deve, de preferência, ser medida novamente. Outra opção será a exclusão de tal amostra do conjunto de calibração. Amostras com resíduo e *leverage* altos devem sempre ser excluídas e o modelo de calibração reconstruído.

4.10 Calibração Multivariada Aplicada à Indústria do Petróleo

O uso da ciência analítica em muitas indústrias está equiparando técnicas de laboratório à investigação e controle de processos de produção. As tecnologias analíticas são aplicáveis às atividades que necessitam de aumento no controle de produção, produtos com maior qualidade e melhor uso das fontes. A espectroscopia, em particular UV, NIR e FTIR, é bem sucedida para estes tipos de aplicações. As técnicas são rápidas, com o mínimo de preparação de amostra e são robustas o suficiente no sentido mecânico e analítico para se ajustar à produção. Nestas aplicações, os espectrômetros são, efetivamente, sensores de concentração e outras propriedades para o processo (GEORGE; WILLIS, 1990, cap. 6).

A idéia de utilização de sensores virtuais é antiga e remonta à modelagem matemática de processos com enfoque na predição de propriedades a partir de dados da unidade industrial. Os primeiros sensores virtuais, surgiram a partir de sistemas de controle indiretos, nos quais a variável a ser estimada (primária) e difícil de ser medida era controlada através do comportamento de outras variáveis (secundárias), normalmente temperaturas (ZANATA, 2005, p.11). Muitos são os benefícios da espectroscopia em processos, e incluem a segurança industrial, monitoramento e ajustes operacionais em tempo real, aumento da qualidade do produto, minimização de desperdícios, otimização da capacidade de produção e minimização de custos (WORKMAN JR, 2002, p.15).

A aplicação de calibração multivariada na indústria do petróleo está focada principalmente na qualidade de seus produtos intermediários e finais. A tabela 7 mostra alguns trabalhos desenvolvidos nos últimos quinze anos, visando-se a previsão de propriedades físico-químicas do petróleo e produtos. Observa-se que a técnica espectroscópica mais popular é o infravermelho na região NIR, embora todas as outras técnicas sejam passíveis de utilização. Alguns parâmetros importantes para verificar a qualidade dos modelos, como o RMSEV ou RMSEP não indicam realmente se o modelo possui boa capacidade preditiva por si só. É preciso avaliar o número de fatores, componentes principais ou variáveis latentes usadas na sua construção, já que um número elevado dos mesmos pode indicar rigidez de ajuste. O número de amostras de calibração e validação também fornecem pistas da qualidade do modelo. Por exemplo, no trabalho de CHUNG, KU e LEE (1999) observa-se que o mesmo apresentou somente amostras para calibração. Sem um

conjunto de validação não é possível avaliar a capacidade preditiva do modelo apresentado. Mesmo analisando um gráfico da variável medida x calculada, os resultados não podem ser considerados satisfatórios. A figura 36 mostra um aglomerado de pontos de todos os experimentos desenvolvidos, porém são amostras de treinamento e todos os pontos da curva de destilação, totalizando 13 propriedades, estão apresentados ao mesmo tempo neste gráfico. Assim, pela escala o ajuste parece centrado em $y=x$, porém pela especificação da gasolina, há muita importância na quantidade de substâncias leves, médias e pesadas, o que não é possível avaliar na figura 38 com precisão.

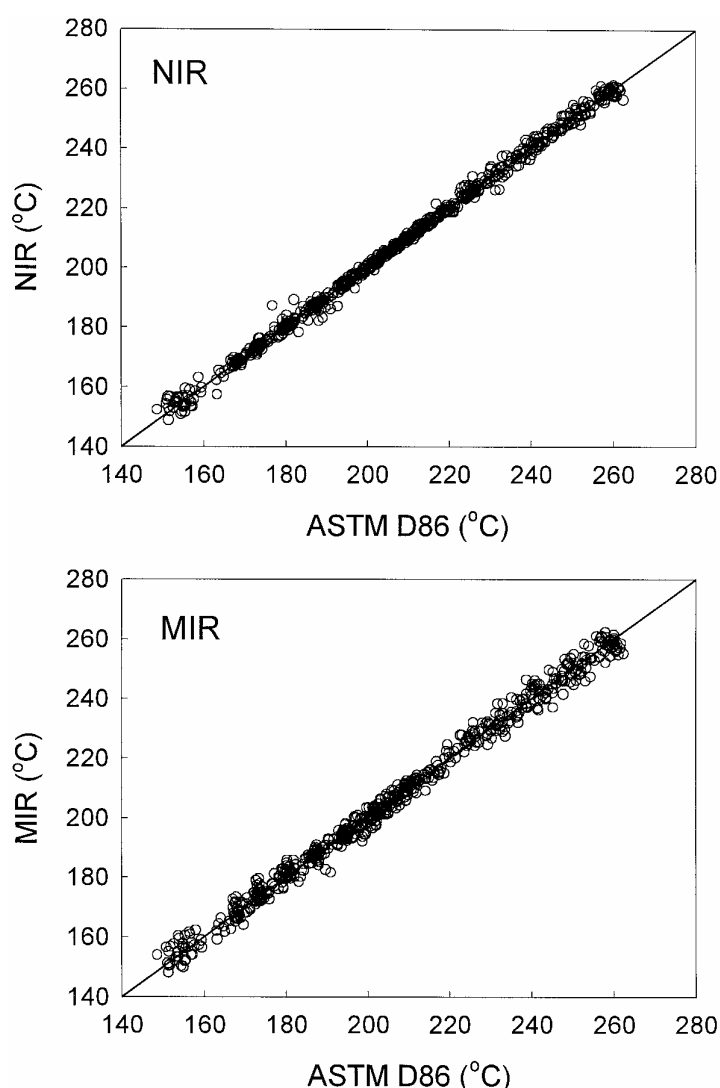


FIGURA 36 – CORRELAÇÃO ENTRE OS MÉTODOS IV E O EXPERIMENTAL (ASTM D86) PARA TODAS AS TEMPERATURAS DA CURVA DE DESTILAÇÃO.

FONTE: CHUNG; KU; LEE, (1999)

Entre os trabalhos apresentados na tabela 7, somente dois deles mostraram os gráficos de variáveis previstas x calculadas e, nestes casos pode-se avaliar com

melhor precisão a qualidade dos modelos apresentados. O trabalho de Andrade *et al.* (2003), apresentou valores de RMSEV muito similares dos outros apresentados na tabela 5. Apesar disso o valor de RMSEV fornece uma falsa impressão de que os modelos obtidos possuem boa capacidade de previsão, porém ao se observar a figura 37, as propriedades (B), (D) e (F) possuem apenas uma boa tendência de previsão.

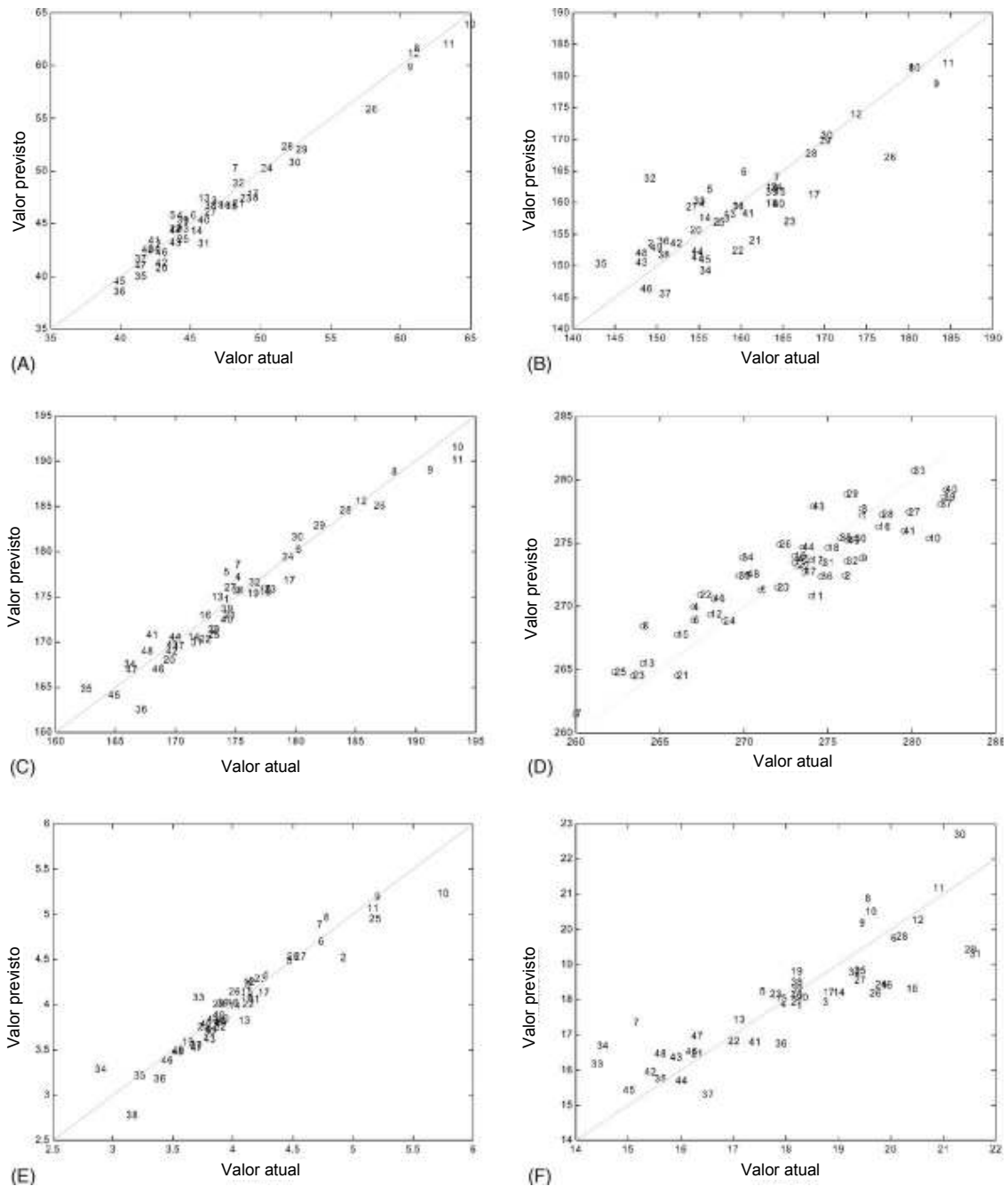


FIGURA 37 – VALORES PREVISTOS X REAIS DE PROPRIEDADES DO QUEROSENE. (A) PONTO DE FULGOR, (B) PONTO INICIAL DE EBULIÇÃO, (C) T₁₀, (E) VISCOSIDADE E (F) % AROMÁTICOS

FONTE: ANDRADE *et al.* (2003)

No trabalho de BLANCO *et al.* (2001b) os gráficos apresentados contém uma informação a mais, que é o intervalo de confiança de reprodutibilidade dos ensaios ASTM e IP, utilizados para obtenção das propriedades do estudo (figura 38). Desta forma fica fácil observar a variação de previsão das amostras de calibração e validação e se elas estão dentro do intervalo experimental de cada método.

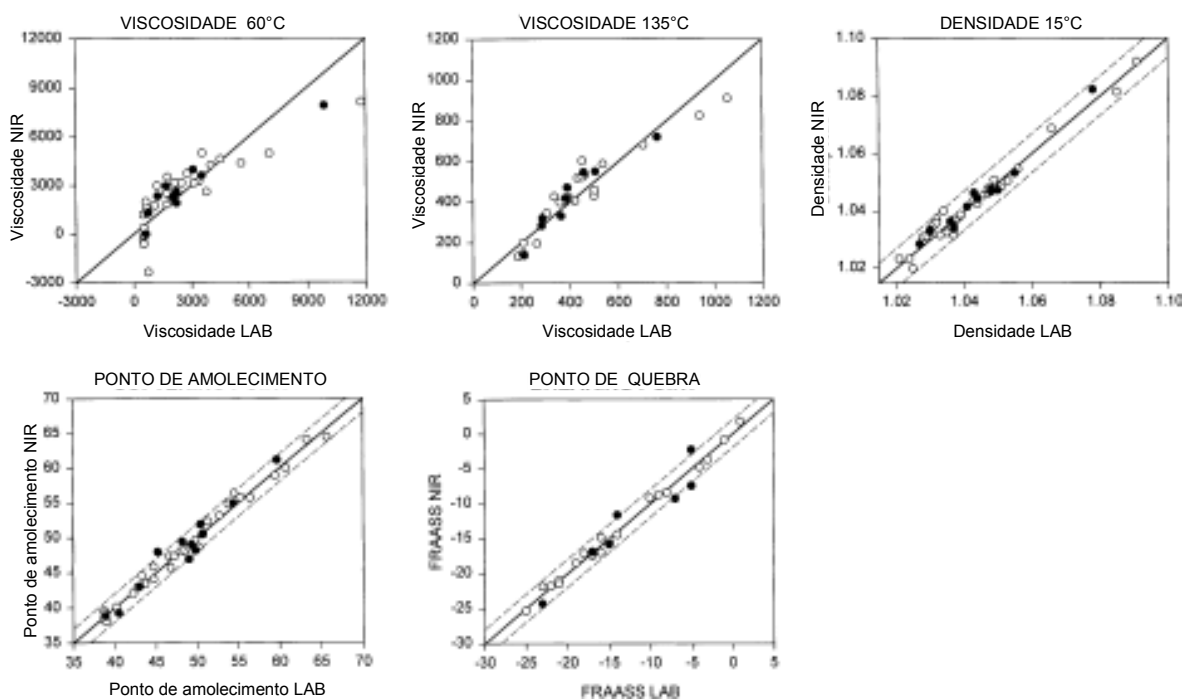


FIGURA 38 – VALORES PREVISTOS X REAIS DE PROPRIEDADES DO BETÚMEM.

NOTA: O Conjunto de validação está representado pelos pontos cheios, enquanto que o conjunto de calibração está representado pelos pontos vazados.

FONTE: BLANCO *et al.* (2001b)

TABELA 05 – TRABALHOS DESENVOLVIDOS EM DIFERENTES DERIVADOS DE PETRÓLEO APLICANDO-SE CALIBRAÇÃO MULTIVARIADA.
CONTINUA

Matriz	Modelo	Pré-tratamento	Nº CP ou VL	Técnica espectr.	Propriedade prevista	Número de amostras	RMSEP ou r ² (melhor resultado)	Referência
Betúmen	PLS	Primeira e segunda derivada com polinômio de segunda ordem e janela de 11 e 21 pontos.	Varia de 4 a 13	NIR	Viscosidade a 60 e 135°C, densidade a 15°C, ponto de suavização, ponto de quebra,	Varia de 22 a 32 trein. 7 a 14 valid.	334; 21; 0,002; 1,4; 2	BLANCO <i>et al.</i> , 2001.
Diesel	PLS	Primeira derivada com polinômio de segunda ordem e janela de 11 pontos.	Não especificado	FT-NIR	Densidade, T ₁₀ e T ₉₀	70 trein. 50 valid. 50 prev.	PLS: 1,6; 5,3; 4,0.	GALVÃO <i>et al.</i> , 2005.
Diesel	PLS	Primeira derivada e normalização de vetor	Varia de 1 a 10 conforme propriedade	FT-MIR (ATR) FT- NIR FT-Raman	Índice de cetano, densidade, viscosidade, T ₅₀ e T ₈₅ e % de enxofre	45 trein. 45 valid.	ATR: 0,781; 0,989; 0,933; 0,92; 0,822; 0,702	SANTOS JR. <i>et al.</i> , 2005.
Diesel	PLS MLR	Primeira derivada com polinômio de segunda ordem e janela de 11 pontos.	Varia de 7 a 12 conforme propriedade	FT-NIR	densidade, T ₁₀ e T ₅₀ e % de enxofre	85 trein. 85 valid.	MRL: 1,5; 2,3; PLS: 3,0; 0,02	GALVÃO <i>et al.</i> , 2006.
Gás Natural	PCR PLS	Sem	Não especificado	FT-MIR e NIR	%metano; %etano; %propano	22 trein. 2 valid.	PLS e NIR: 0,97	MAKHOUKHI <i>et al.</i> , 2005.
Nafta	PCR PLS	Não especificado	Não especificado	FT- NIR	Arom. C ₆ e C ₁₀	132 trein.	1% máx.	MACHO; LARRECHI, 2002.

CONTINUA

Matriz	Modelo	Pré-tratamento	Nº CP ou VL	Técnica espectr.	Propriedade prevista	Número de amostras	RMSEP ou r ² (melhor resultado)	Referência
Nafta média	PLS	Auto escalonamento	Varia de 4 a 8 conforme propriedade	FT-NIR	Parafínicos, isoparafínicos, olefínicos, naftênicos, aromáticos, densidade, curva de destilação.	53 trein. 13 valid.	0,24; 0,17; 0,07; 0,26; 0,14; 0,0004; FBP: 3,13	REBOUCAS; SANTOS; VIEIRA, 2007
Óleo lubrificante	PLS	Centralizado na média MSC	6	FT- MIR (ATR)	Contaminação com água, etileno glicol e gasolina	20 água; 34 glicol; 24 gasolina (trein.) 5;6;5 (valid.)	0,023; 0,037; 0,34	BORIN; POPPI, 2005.
Petróleo	PLS	Centralizado na média	Varia de 6 a 8 conforme propriedade	FT-NIR	Curva de destilação e °API	27 trein. 22 valid.	PLS: 1,3 e 0,24	PASQUINI; BUENO, 2007
Querosene de aviação	PLS	Não especificado	Varia de 7 a 12 conforme propriedade	FT-NIR FT-MIR (ATR)	Curva de destilação	50 trein.	NIR: 3,4 (IBP) e 2,2 (FBP)	CHUNG; KU; LEE, 1999.
Querosene de aviação	MLR PCR PLS	Centralizado na média	- 10 3 e 4	FT-MIR	Densidade, ponto de cong., ponto de fulgor, %arom.; IBP; FBP; viscosidade	17 trein. 12 valid.	PLS: 0,0021; 1,6; 2,1; 1,2; 2,7; 2,0; 0,2.	GARRIGUES <i>et al.</i> , 1995.
Querosene de aviação	MLR PCR PLS	Centralizado na média	3 2 para densidade	FT-MIR	Densidade, ponto de cong., ponto de fulgor, %arom.; IBP; FBP; viscosidade	17 trein. 12 valid.	PLS: 0,0017; 1,6; 2,1; 2,3; 1,9; 1,4; 0,2.	ANDRADE <i>et al.</i> , 1996.

CONCLUSÃO

Matriz	Modelo	Pré-tratamento	Nº CP ou VL	Técnica espectr.	Propriedade prevista	Número de amostras	RMSEP ou r ² (melhor resultado)	Referência
Querosene de aviação	PLS	Auto escalonamento	4 e 5 2 para arom.	FT-Raman	Ponto de fulgor, IBP, T ₁₀ , FBP, viscosidade, % aromáticos	50 trein. 50 valid.	1,9; 2,3; 1,0; 2,8; 0,19; 0,7	ANDRADE <i>et al.</i> , 2003.
Querosene de aviação	PLS	Não especificado	Varia de 9 a 14 conforme propriedade	FT-MIR Fase vapor	Ponto de fulgor, ponto de cong., IBP, T ₁₀ , T ₉₀ , FBP, % aromáticos	50 trein. 50 valid.	0,61; 0,95; 1,71; 1,0; 0,43; 2,74; 0,71	CARRACEDO <i>et al.</i> , 2003.

NOTA: As abreviações trein., valid. e prev., refere-se ao treinamento, validação e previsão. As abreviações arom. e cong. referem-se aos aromáticos e congelamento. IBP E FBP referem-se ao *initial boiling point* e *final boiling point* da curva de destilação.

A tabela 6 apresenta trabalhos de calibração multivariada para previsão de propriedades da gasolina. Novamente observa-se a preferência pela espectroscopia NIR, e a maioria dos trabalhos apresenta somente valores do RMSEP ou SEP para avaliar a capacidade preditiva dos modelos desenvolvidos. Alguns não mencionaram sequer o número de componentes principais ou variáveis latentes, como nos trabalhos de LITANI-BARZILAI *et al.* (1997) e IOB, BUENAFE e ABBAS (1998). Neste último, os autores apresentaram um gráfico de concentração prevista x calculada de todos os tipos de oxigenados investigados (figura 39). Porém fica difícil visualizar quais são os pontos de cada oxigenado, impossibilitando uma análise mais acurada.

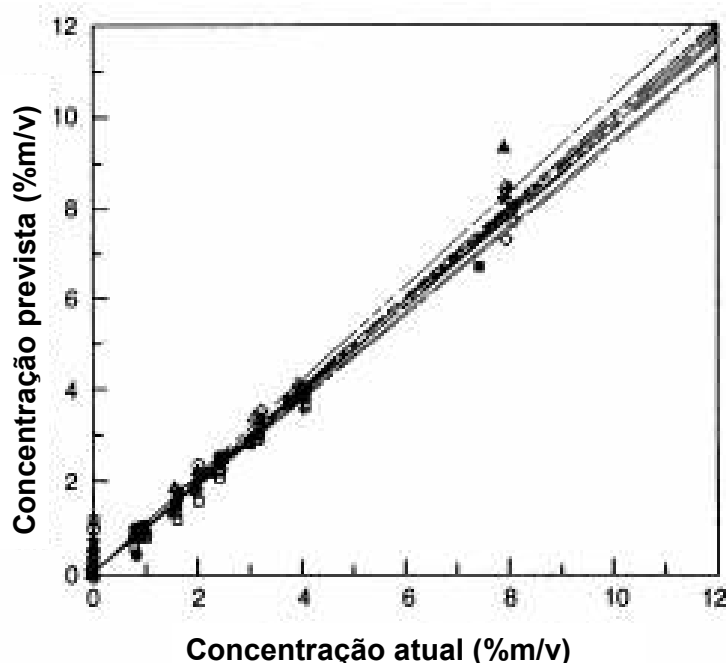


FIGURA 39 – VALORES PREVISTOS X REAIS DE TEORES DE OXIGENADOS ADICIONADOS À GASOLINA.
FONTE: IOB; BUENAFE; ABBAS, (1998)

O trabalho de TEIXEIRA *et al.* (2007) foi o único dos artigos investigados que apresentou gráficos de propriedades previstas x calculadas (figura 40). Embora o conjunto de validação seja pequeno, os gráficos permitiram verificar a boa qualidade dos modelos obtidos. O ideal seria apresentar uma tabela com os valores previstos e calculados, com os respectivos desvios de previsão, assim cada ponto poderia ser avaliado individualmente.

Um problema identificado neste trabalho é que o conjunto de amostras foi integralmente montado adulterando-se três matrizes de gasolina com 4 tipos de solventes. Isto significa que, ao aplicar o modelo em situações reais, como uma adulteração proveniente do mercado, os modelos talvez não sejam robustos o suficiente para prever a quantidade e tipo de adulterante, já que a amostra de gasolina pode ter características físico-químicas bastante diferentes daquelas usadas para montagem dos modelos. Isto é um problema bastante comum, no qual fabrica-se o conjunto de dados para aplicações reais. Dificilmente as amostras reais se encaixam no modelo obtido. O ideal seria coletar amostras durante um longo período tentando obter o tipo de adulteração desejada e fabricar outras de maneira que o conjunto de dados fique representativo da situação real. Tornar um conjunto de dados representativo de uma população e igualmente distribuído é uma tarefa demorada e difícil.

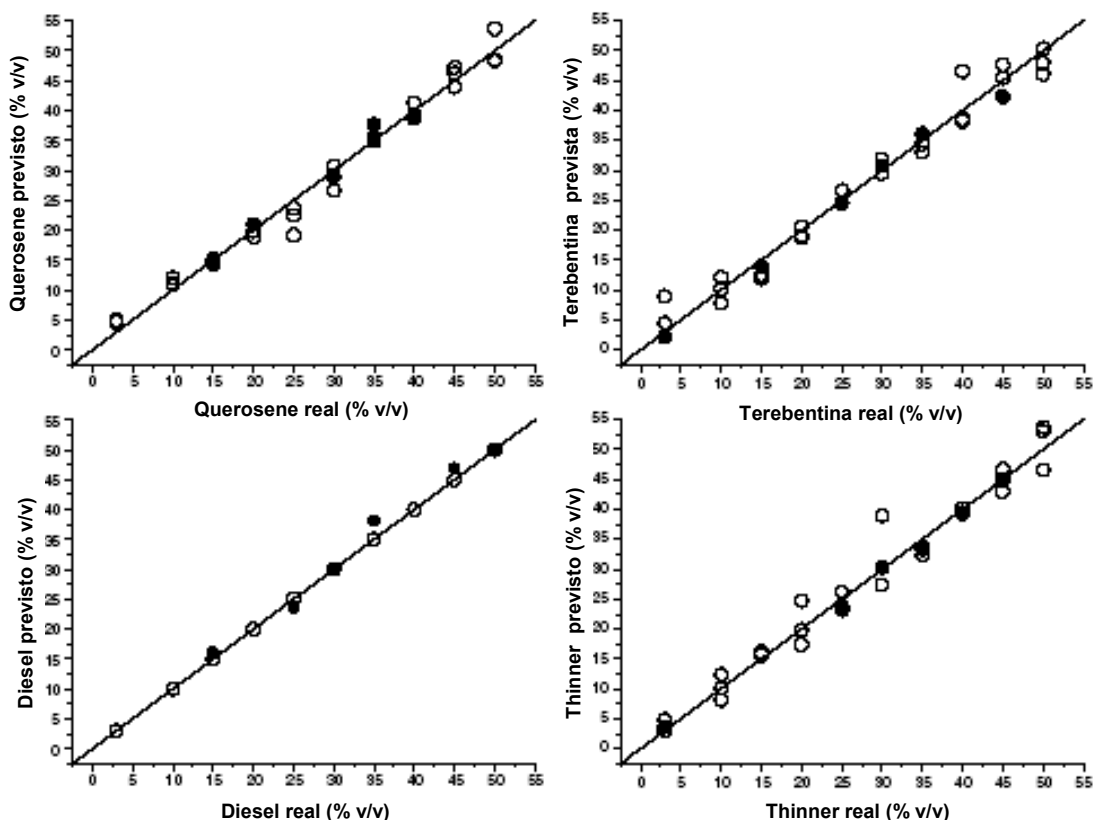


FIGURA 40– VALORES PREVISTOS X REAIS DE TEORES DE ADULTERANTES ADICIONADOS À GASOLINA.

NOTA: Pontos vazados referem-se ao conjunto de calibração, enquanto que pontos cheio referem-se ao conjunto de validação.

FONTE: TEIXEIRA *et al.*, (2007)

TABELA 06 – TRABALHOS DESENVOLVIDOS APLICANDO-SE CALIBRAÇÃO MULTIVARIADA EM GASOLINA.

CONTINUA

Matriz	Modelo	Pré-tratamento	Nº CP ou VL	Técnica espectr.	Propriedade prevista	Número de amostras	RMSEV ou r^2 (melhor resultado)	Referência
Gasolina	PLS	Centralizado na média	5	FT-NIR	Índice antidetonante	40 trein. 15 valid.	0,24	KALIVAS, 1997
Gasolina comum e alta octanagem	PCR PLS	Correção de linha de base por janela média móvel e normalização	Não especificado	FT-NIR (on line)	RON, MON, PVReid, % MTBE, °API, %olef., % benzeno, % arom., T ₁₀ e T ₅₀ .	31 a 233 trein. 31 a 103 valid.	PLS: 0,33; 0,27; 0,45; 0,76; 0,8; 1,31; 0,04; 1,59; 4,09, 3,71	LITANI-BARZILAI, 1997
Gasolina	PLS	Não especificado	Não especificado	FT-MIR	% de 9 tipos de álcoois	32 trein.	+/- 0,3%	IOB; BUENAFE; ABBAS, 1998
Gasolina A e comum	PLS	Normalização vetorial Primeira derivada com alisamento e janela de 13 pontos	9 e 7	FT-NIR	Densidade e MON	39 trein. 37 valid.	0,0026 e 0,33	OLIVEIRA <i>et al.</i> , 2004
Gasolina	PLS	Divisão dos espectros pela máx. absorbância	8 e 4	FT-MIR FT-NIR	% benzeno e RON	249 (divisão do conj. não mencionado)	NIR: 12,8 e 0,52	FELÍCIO <i>et al.</i> , 2005
Gasolina	PLS	Não especificado	4	FT-NIR	Índice antidetonante	60 trein.	0,25	BARROS <i>et al.</i> , 2007
Gasolina	PLS	Centralizado na média	4 a 11	FT-NIR	Densidade, T ₁₀ , T ₅₀ e T ₉₀	63 trein. 20 valid. 20 prev.(mesmo conjunto)	1,9; 0,7; 0,4 e 1,6	SANTOS <i>et al.</i> , 2007
Gasolina	PLS	Centralizado na média	2 a 5	FT-NIR	% adulterantes	27 trein. 6 valid.	1,8 e 1,9	TEIXEIRA <i>et al.</i> , 2007

								CONCLUSÃO
Matriz	Modelo	Pré-tratamento	N° CP ou VL	Técnica espectr.	Propriedade prevista	Número de amostras	RMSEV ou r^2 (melhor resultado)	Referência
Gasolina	MLR PLS Poly-PLS Spine-PLS ANN	Diversos	Varia de 9 a 18	FT-NIR	Densidade e curva de calibração	96 trein. 104 valid	ANN: 2,0 e 1,7 (FBP)	BALABIN; SAFIEVA; LOMAKINA, 2007
Gasolina	PLS-1 PLS-2	Correção de linha de base e primeira derivada	4 VL no máximo	FT-NIR	% de etanol e metanol	78 trein. (preparado em laboratório) 40 valid. (preparado em laboratório) 15 (teste com amostras comerciais)	0,31 e 0,32 para metanol 0,28 e 0,28 para etanol	FERNANDES <i>et al.</i> , 2008

NOTA: As abreviações trein. , valid. e prev., refere-se ao treinamento, validação e previsão.

4.11 Outros Estudos em Combustíveis Automotivos Desenvolvidos no Brasil

Devido à implantação de dois importantes programas pela ANP (Programa de Monitoramento de Qualidade de Combustíveis - PMQC e Programa de Recursos Humanos – PRH), o Brasil passou a ser gerador de pesquisa na área de petróleo e biocombustíveis. Os trabalhos têm contribuído significativamente para o desenvolvimento de diversas áreas, sendo que os estudos em combustíveis automotivos destacam-se com alguns trabalhos interessantes. A maioria deles visa a detecção da fraude de adulteração que é muito difícil, já que envolve a adição de hidrocarbonetos ou suas misturas, que normalmente estão presentes na composição química da gasolina.

TAKESHITA *et al.* (2008) estudaram a influência de diversos tipos de solvente (álcool etílico anidro, nafta leve (*white spirit*), alquilbenzenos-AB9 e diesel) sobre propriedades físico-químicas (curva de destilação, densidade e pressão de vapor *Reid*). Foram preparadas diversas amostras, variando-se a quantidade do solvente adicionado até 90% no caso do etanol e, no máximo, 50% com relação aos outros solventes e os ensaios ASTM foram executados. O estudo mostrou diferentes comportamentos conforme a classe de solvente e a quantidade adicionada à gasolina. No geral, a adição de AB9, diesel e nafta leve aumentou as temperaturas de destilação da mistura, enquanto que o etanol diminuiu. A detecção de adulteração por diesel foi facilmente identificada na curva de destilação em uma quantidade de 2%, enquanto que os outros solventes influenciaram no ponto de inflexão da curva de destilação, que é o ponto no qual ocorre uma súbita mudança na temperatura. A localização do ponto de inflexão permitiu distinguir o tipo de adulteração (qual solvente foi adicionado) e pode ser usado como ferramenta para detecção de adulteração pela curva de destilação. Com relação à pressão de vapor *Reid*, somente a adição de etanol pode aumentar a pressão de vapor da mistura, porém o limite estabelecido pela ANP, que é de 69,0 kPa, não foi atingido em nenhum caso, revelando que esta propriedade não detecta os tipos de adulteração estudados. Quanto à densidade, observou-se que a mesma aumenta com o aumento das proporções de solventes, sendo que para o diesel e para o solvente aromático AB9, o aumento foi mais acentuado. Como não existem limites inferior ou superior especificados pela ANP, fundamentou-se em limites informados em outro trabalho (CÔCCO, YAMAMOTO e VON MEIEN, 2005), e considerados de maneira

errônea como limites de legislação para a densidade (0,74 a 0,78 g/cm³), porém os limites estavam relacionados apenas com a escolha de amostras. Os resultados de densidade em TAKESHITA *et al.* (2008), mostraram que existe variação suficiente para detecção dos adulterantes, porém sem os limites inferiores ou superiores, a discussão a respeito da densidade fica sem fundamentação. Seria interessante medir a densidade de amostras de gasolina dentro das especificações, para posterior comparação, melhorando a estimativa destes limites.

A adição de etanol à gasolina também foi estudada por DELGADO; ARAUJO e FERNANDES JR. em 2007 para avaliar propriedades físico-químicas (curva de destilação, número de octanas, massa específica, pH e condutividade) de misturas com 20, 40, 60 e 80% de etanol (hidratado) em gasolina comum. O objetivo foi avaliar os efeitos na tecnologia *flex* em veículos. Observou-se que os parâmetros pH e condutividade de todas as misturas estavam de acordo com as especificações da ANP e não influenciam na qualidade final da combustão. Quando adicionou-se etanol, ocorreu o aumento da massa específica, não sendo tão desejável, pois uma grande massa específica injeta maior quantidade de combustível no motor. Com relação à curva de destilação, observou-se que a presença do etanol aumenta as temperaturas nos pontos T₁₀ e T₅₀ e diminui no ponto T₉₀. A diminuição da temperatura no ponto a 90% destilado é desejável, pois a deposição de sólidos no motor é suavizada. Porém, para melhor partida do motor é importante que os pontos iniciais da curva sejam baixos. Observou-se também que o número de octanas aumenta com a adição de etanol, melhorando o desempenho do motor. Ao avaliar todas as propriedades, os autores recomendam a utilização de etanol hidratado em uma faixa de 40 a 60% para motores que funcionam com tecnologia *flex*.

FLUMIGNAN *et al.* (2007) selecionaram amostras de gasolina comercial utilizando análise hierárquica de *clusters* de uma população de 2400 amostras coletadas em um período de 6 meses. Analisando-se 12 propriedades físico-químicas, 150 amostras foram escolhidas como representativas da população inicial, realizando-se análise cromatográfica para obtenção do perfil cromatográfico de cada amostra. Um programa para classificação de dados, o SIMCA (*Soft Independent Modelling of Class Analogy*) foi utilizado para modelar o perfil cromatográfico e prever se a amostra está ou dentro das especificações estabelecidas pela ANP. Foi possível classificar corretamente 96% das amostras presentes no conjunto de treinamento com 100 amostras, enquanto que no conjunto de teste, com 50

amostras, a classificação alcançou 94% de acerto, mostrando que a ferramenta SIMCA pode ser utilizada para classificar, em termos de conformidade, amostras de gasolina a partir de seu perfil cromatográfico com 75 minutos de corrida. Na seqüência, FLUMIGNAN *et al.* (2008) utilizaram calibração multivariada para previsão de propriedades físico-químicas da gasolina tais como densidade relativa, teor de etanol, teor de benzeno, curva de destilação (T_{10} , T_{50} , T_{90} e ponto final) e resíduo de destilação. Previu-se a composição química usando os dados do infravermelho portátil IROX 2000, além de MON, RON e IAD ($IAD = MON + RON/2$). A seleção de amostras foi realizada, aplicando-se análise hierárquica de *clusters*, conforme foi explicado no trabalho anterior (FLUMIGNAN *et al.*, 2007). Desta maneira os bancos de dados de treinamento e teste ficaram representativos da população original. Em média, utilizou-se 3 ou 4 variáveis latentes para representar cada variável estudada e os desvios de previsão das propriedades físico-químicas ficaram em níveis aceitáveis. O menor desvio relativo médio foi para previsão da densidade, enquanto que o maior desvio relativo médio ficou em 18,86% para o resíduo de destilação. A capacidade preditiva dos modelos PLS, obtidos para previsão da composição de hidrocarbonetos, ficou comprometida com resultados não muito bons. Isto porque, segundo os autores, a técnica de infravermelho (portátil) utilizada como base para fornecimento dos dados de composição possui baixa acuracidade.

A análise SIMCA também foi utilizada por OLIVEIRA F.S. *et al.* (2004) que montaram um modelo com 5 componentes principais e 34 amostras de gasolina no treinamento, a partir de diversas propriedades físico-químicas (densidade, MON, RON, IAD, curva de destilação e resíduo, teor de benzeno, olefínicos e aromáticos). Todas as 16 amostras de gasolina que fazem parte do conjunto de teste foram classificadas corretamente pelo modelo gerado, porém 4 amostras do conjunto de calibração que eram conformes, foram consideradas pelo modelo como não conformes. As gasolinas utilizadas neste estudo foram coletadas randomicamente e oito amostras que não estavam dentro da especificação foram separadas no conjunto de teste. Deste modo, observa-se que o conjunto de treino possuía apenas amostras conformes. Os autores concluíram que os parâmetros físico-químicos usados para montagem do modelo não foram suficientes para classificar de maneira correta todas as amostras de treinamento. O parâmetro T_{60} pode melhorar significativamente a capacidade do modelo, porém não é usual a sua utilização já que

não é especificado pela ANP. É possível que parâmetros do tipo resíduo de destilação, e dados obtidos através do infravermelho portátil não sejam boas variáveis preditoras, pois existe uma natural e grande variabilidade inserida no banco de dados de entrada, prejudicando um pouco a modelagem.

Uma análise hierárquica de *clusters* possibilitou detectar adulterações da gasolina por solventes no estudo desenvolvido por WIEDEMANN, D'AVILA e AZEVEDO (2005). Vinte amostras preparadas em laboratório e 20 coletadas em postos de combustíveis foram separadas em quatro grupos distintos, fundamentadas em um banco de dados com 11 parâmetros físico-químicos (MON, RON, IAD, % de benzeno, T₁₀, T₅₀, T₉₀, T₉₈, e % de hidrocarbonetos alifáticos leves, pesados e aromáticos obtidos por cromatografia gasosa). Os autores concluíram que adulterações por solventes alifáticos pesados são fáceis de serem detectadas, desde que não estejam presentes na composição original. Houve dificuldades para identificar adulterações por solventes aromáticos, que deve exceder em 19,5% e em solventes leves, que devem exceder em 28% para serem detectados. Isto ocorreu porque os compostos detectados são comumente encontrados na gasolina.

Outros autores brasileiros já foram citados anteriormente tais como OLIVEIRA *et al.* (2004), SANTOS *et al.* (2007); GALVÃO *et al.* (2005 e 2006); TEIXEIRA *et al.* (2007); REBOUCAS, SANTOS e VIEIRA (2007); BORIN e POPPI (2005); PASQUINI e BUENO (2007), FERNANDES *et al.* (2008), e seus resultados estão detalhados nas tabelas 5 e 6, e não há necessidade de repetir a análise dos resultados. No geral os trabalhos são diferenciados, mesmo tendo um objetivo em comum, que é a detecção de adulteração em gasolina, contribuindo cada um para o desenvolvimento da pesquisa científica em combustíveis automotivos.

5 MATERIAL E MÉTODOS

5.1 Amostras

As amostras utilizadas eram de gasolina comum e aditivada, coletadas em recipiente próprio, de vidro âmbar e armazenadas abaixo de 10°C ou local fresco. A amostragem foi realizada nos anos de 2005 a 2007, fundamentando-se em resultados prévios obtidos pelos infravermelhos portáteis existentes em laboratório, capazes de fornecer uma composição química aproximada (figuras 41 e 42). Também foram escolhidas pelos resultados dos ensaios ASTM, tentando encontrar amostras diferenciadas da média, com a finalidade de abranger um espaço de amostragem amplo. Para obtenção de amostras diferenciadas foi necessário coletar amostras que estavam fora das especificações da ANP. Com isto obteve-se um conjunto de dados de 128 amostras o mais heterogêneo possível, permitindo a construção de modelos robustos. Do total, 22 amostras são gasolinas aditivadas e o restante, gasolina C. O número de amostras poderia ser ampliado com outras amostras de composição similar ao banco de dados existente, porém ocorreria repetição de informação, sendo irrelevante para a modelagem matemática. As amostras coletadas foram descartadas após um período de 3 a 6 meses de estocagem, respeitando-se o período de guarda exigido pelo Programa de Monitoramento de Qualidade de Combustíveis (PMQC).



FIGURA 41 – GS 1000 DA PETROSPECT
FONTE: LACAUT_{ets} / UFPR



FIGURA 42 – IROX 2000 DA GRABNER
FONTE: LACAUT_{ets} / UFPR

Os infravermelhos portáteis acima apresentados analisam gasolina por infravermelho médio. O GS 1000, utiliza 17 filtros que selecionam as bandas espectrais de interesse, correspondentes ao infravermelho médio, e pela absorvância de cada componente pode-se quantificá-los dentro do grupo a qual pertencem (GS 1000, 2000, p. 6). A ferramenta matemática usada neste modelo é a regressão linear múltipla (RLM) e prevê a concentração de benzeno, etanol, aromáticos, olefínicos, saturados, MON e RON. O outro infravermelho portátil é o IROX 2000. Este equipamento faz uma varredura para obtenção do espectro. Sua resolução é de $0,8 \text{ cm}^{-1}$ e coleta dados desde $646,4$ até $1789,4 \text{ cm}^{-1}$. A ferramenta matemática usada para obtenção de correlações é a Matriz K, equivalente à regressão dos mínimos quadrados (IROX 2000, 2001, p.3). As correlações são utilizadas para previsão de teores de metanol, etanol, aromáticos, olefínicos, saturados, densidade, MON e RON.

5.2 Infravermelho

O equipamento utilizado para obter os espectros no infravermelho é um Excalibur FT, com acessório ATR, com transformada de Fourier, situado no Departamento de Química da UFPR. A faixa de aquisição de dados foi de 4000 a 400 cm^{-1} , referente ao infravermelho médio, com resolução de 4 cm^{-1} , com 32 e 16 *scans* de varredura. A correção do *background* é realizada automaticamente. A célula para leitura de amostra é de seleneto de zinco. Realizou-se testes preliminares com célula de cloreto de sódio e também com nujol. Os dados de transmitância foram exportados para utilização em outros programas estatísticos.



FIGURA 43 – ESPECTRÔMETRO MID/NIR
EXCALIBUR
FONTE: VARIAN INC. (2007)

5.3 CG-FID

O cromatógrafo utilizado para a análise detalhada da composição química da gasolina é um CG-FID Varian CP-3800, apresentado na figura 44. O cromatograma gerado é utilizado pelo programa DHA para quantificação e identificação dos compostos presentes na gasolina.



FIGURA 44 – CROMATÓGRAFO CG – FID DA VARIAN INC.
FONTE: LACAUT_{ets} / UFPR

O programa StarDHA™ da Varian Inc., versão 5, foi utilizado para quantificar e identificar automaticamente a maioria dos picos cromatográficos presentes na gasolina.

Utilizou-se um mistura de padrões para identificar compostos por comparação dos tempos de retenção. O *mix* de referência *Qualitative Reference Naphtha Standard*, nº 48265-U é fornecido pela Supelco™ em ampolas de 1mL, acompanhado de um cromatograma impresso com a maioria dos picos identificados.

5.4 CG-MS

O cromatógrafo utilizado para a identificação detalhada da composição química da gasolina é um CG Varian CP-3800 acoplado a um detector de massas do tipo *ion trap* modelo Saturn 2000 (figura 45). A coluna utilizada foi uma capilar da Chrompack de sílica fundida CP-SIL PONA CB da Chrompack, 0,25 mm de diâmetro interno, 100 m de comprimento e 0,5 mm de filme líquido. A biblioteca NIST™ (versão 2005) foi utilizada como ferramenta adicional na identificação das substâncias presentes na gasolina.



FIGURA 45 – CP 3800 ACOPLADO A UM DETECTOR DE MASSAS SATURN 2000 DA VARIAN INC.

FONTE: LACAUT_{ets} / UFPR

As condições operacionais para aquisição do espectro de massa para identificação de amostras de gasolina, foram as seguintes:

- a) temperatura do injetor: 250 °C, split 1:300;
- b) quantidade de amostra injetada: 0,2 a 0,5 µl;
- c) pressão na coluna: 49,5 psi mantida constante;
- d) temperatura do *transfer line*: 200°C;
- e) temperatura do *manifold*: 100°C;
- f) temperatura do *ion trap*: 150°C;
- g) modulação axial: 4V;
- h) intensidade de ionização: 70 eV. Modo de ionização por impacto de elétrons;
- i) *background*: 65 m/z;
- j) *target* TIC: 20000;
- k) tempo máximo de ionização: 2000 µseg;
- l) tempo de pré scan: 100 µseg;
- m) faixa de varredura: 20 a 500 m/z;
- n) programação de temperatura do forno: temperatura inicial de 35°C, permanecendo por 15 minutos, elevação de temperatura a 60°C na razão de 1°C/min. permanecendo por 20 minutos; elevação de temperatura a 200°C na razão de 2°C/min. permanecendo por 10 minutos;
- o) tempo total da corrida: 140 minutos.

Seguiu-se as recomendações do fabricante para ajuste das condições operacionais em modo de ionização química, para os reagentes líquidos acetonitrila e metanol:

- a) nível de estocagem: 19 m/z;
- b) amplitude de ejeção: 15 V;
- c) *background*: 65 m/z;
- d) *target* TIC: 5000;
- e) tempo máximo de ionização: 2000 µseg;
- f) tempo máximo de reação: 40 µseg;
- g) tempo de pré scan: 100 µseg;

- h) faixa de varredura: 20 a 500 m/z;
- i) Coluna capilar Chrompack de sílica fundida CP-SIL PONA CB da Chrompack, 0,25 mm de diâmetro interno, 100 m de comprimento e 0,5 μm de filme líquido;
- j) temperatura do injetor: 250 °C, split 1:300;
- k) quantidade de amostra injetada: 0,2 a 0,5 μl ;
- l) pressão na coluna: 49,5 psi mantida constante;
- m) temperatura do *transfer line*: 150°C;
- n) temperatura do manifold: 100°C;.
- o) temperatura do *ion trap*: 120°C;
- p) programação de temperatura do forno: temperatura inicial de 35°C, permanecendo por 15 minutos, elevação de temperatura a 60°C na razão de 1°C/min. permanecendo por 20 minutos; elevação de temperatura a 200°C na razão de 2°C/min. permanecendo por 10 minutos;
- q) tempo total da corrida: 140 minutos.

5.5 Programa para Calibração Multivariada

O PLS *toolbox* do MATLABTM 7.4.0 (R2007a) foi utilizado para gerar os modelos para previsão das variáveis em estudo. O programa permite aplicar diversos tipos de pré-tratamentos matemáticos de dados, além da escolha de algoritmos para regressão. Permite aplicar outras ferramentas matemáticas, tais como MLR e PCR, que podem ser abordados para comparação com o PLS.

Os pré-tratamentos de dados aplicados aos espectros de infravermelho médio das amostras de gasolina foram: o autoescalamento, aplicação de segunda derivada, alisamento e ortogonalização de sinal. Para as matrizes de dados de saída (composição química e propriedades físico-químicas) aplicou-se o autoescalamento.

5.6 Ensaio ASTM E NBR

Propriedades físico-químicas utilizadas no controle de qualidade da gasolina tipo A e C são especificadas pela ANP através da portaria n°309 de 27/12/2001, apresentada no apêndice A. Esta especificação visa controlar a qualidade da gasolina, além da padronização do produto e ensaios laboratoriais.

Observa-se na especificação, que existem muitas propriedades físico-químicas as quais podem ser modeladas neste trabalho, porém optou-se pela curva de destilação, massa específica e pressão de vapor, que são as propriedades usuais e geram informações importantes a respeito do desempenho em campo do combustível. Os métodos e equipamentos para obtenção das mesmas estão detalhados a seguir.

5.6.1 Massa Específica a 20°C – Método do Densímetro Automático

O equipamento utilizado neste estudo foi o densímetro automático modelo DMA 4500 da Antoon Paar apresentado na figura 46, que determina a densidade da gasolina a 20 °C em g/cm^3 , conforme norma ASTM D 4052 (2002). A densidade da gasolina está relacionada a características de estocagem, mas também pode indicar presença de contaminantes.



FIGURA 46 – DENSÍMETRO DIGITAL DMA 4500 DA ANTOON PAAR
FONTE: LACAUT_{ets} / UFPR

5.6.2 Pressão de Vapor Reid – Método Mini

O aparelho de pressão de vapor, modelo Minivap VPS da Grabner Instruments (figura 47) é utilizado nas análises das amostras de gasolina e segue a norma ASTM D 5191 (2004). Pressão de vapor Reid é a medida da pressão total de 1 ml de amostra com ar saturado a 37,8°C (100°F) dentro de uma câmara de 5 ml. Mede a volatilidade da gasolina.

A volatilidade pode ser entendida como a facilidade de evaporação do combustível. Esta propriedade é extremamente importante, pois a primeira vaporização deve acontecer para que o processo de combustão dentro do motor ocorra (SILVA *et al.*, 2005, p. 954). O controle da pressão de vapor está ligado à segurança no transporte e armazenamento da gasolina, além de limitar possíveis perdas por evaporação. A presença de leves (com valores de ponto de ebulição baixo e pressão de vapor alto) é necessária, pois auxilia a partida a frio do motor.



FIGURA 47 – APARELHO MEDIDOR DE PRESSÃO DE VAPOR
MINIVAP VPS DA GRABNER INSTRUMENTS
FONTE: LACAUT_{ets} / UFPR

5.6.3 Curva de Destilação – Método da Destilação Atmosférica

A figura 48 mostra os equipamentos disponíveis em laboratório para realização dos ensaios de curva de destilação:

- a) 02 destiladores automáticos Herzog mod. HDA628 (master)
- b) 02 destiladores automáticos Herzog mod. HDA627 (slave).

Neste ensaio, 100 ml de gasolina são evaporados e condensados sob condições padronizadas. A taxa de destilação da amostra deve estar entre 4 a 5 ml/min, proporcionando uma destilação uniforme ao longo do tempo. O condensado é recolhido em uma proveta graduada calibrada, permitindo a leitura do volume de destilado. São feitas observações sistemáticas de temperatura a cada volume especificado de condensado, possibilitando o levantamento da curva de destilação do produto. É um teste básico de determinação das características de volatilidade do combustível, sendo utilizado para verificar as proporções leves, médias e pesadas do combustível. É utilizado também como indicador de contaminação com outros produtos leves ou pesados.



FIGURA 48 – DESTILADORES AUTOMÁTICOS HDA 627 E 628 DA HERZOG

FONTE: LACAUT_{ets}/UFPR

NOTA: o modelo à esquerda refere-se ao “master”, que controla o da direita (“slave”)

Conforme a norma ASTM D 86 (2005), as características de destilação de hidrocarbonetos têm um importante efeito na sua segurança e desempenho, especialmente no caso de combustíveis. A faixa de ebulição dá informações da composição, das propriedades e do comportamento do combustível durante a sua estocagem e uso. As características são criticamente importantes para as gasolinas automotivas e de aviação, afetando a partida, o aquecimento do motor, e a tendência de tamponamento por vapor à alta temperatura de operação. A presença de componentes de alto ponto de ebulição pode afetar significativamente o grau de formação de depósitos sólidos de combustão.

6 RESULTADOS E DISCUSSÃO

6.1 Infravermelho

6.1.1 Avaliação do sinal analítico

Com o objetivo de avaliar as opções de células para leitura no infravermelho e verificar o sinal analítico para a gasolina, realizou-se leituras dos padrões o-xileno, m-xileno e p-xileno, bem como do xileno comercial (mistura de xilenos) em células para líquido de fluoreto de cálcio (CaF_2) e célula para ATR de seleneto de zinco (ZnSe). Os xilenos representam a classe dos aromáticos presentes na gasolina e foram utilizados para este prévio estudo porque são substâncias puras, e seus espectros no IV são conhecidos. Com isto pode-se verificar se existe ou não sobreposição de bandas.

O teste inicial foi em célula especial para líquido de fluoreto de cálcio. Verificou-se a saturação (extrapolamento) do sinal, fornecendo espectros não adequadamente resolvidos e com grande intensidade. A figura 49 mostra um problema de saturação do sinal analítico em 3000 cm^{-1} e na região abaixo de 1000 cm^{-1} . Observa-se também a baixa resolução dos picos na região próxima aos 1500 cm^{-1} , na qual ocorre a sobreposição dos picos de maior intensidade. Portanto, utilizar uma célula de CaF_2 para análise de gasolina não é recomendada.

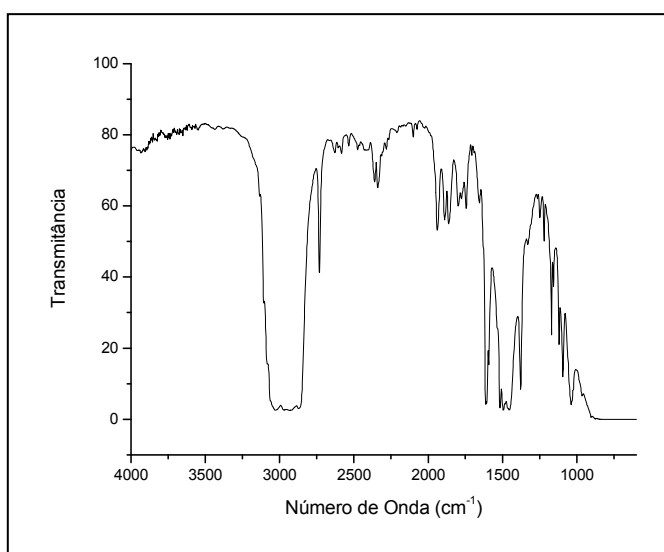


FIGURA 49 – ESPECTRO DE INFRAVERMELHO DO XILENO COMERCIAL EM CÉLULA DE CaF_2 .

Devido à impossibilidade de utilização do sinal analítico da opção anterior, realizaram-se medidas para as mesmas substâncias em nujol, diluindo-as para permitir a visualização das bandas. O nujol é uma mistura de hidrocarbonetos parafínicos de cadeia longa (MALLINCKRODT CHEMICALS, 2008) e é amplamente utilizado como diluente de outras substâncias, líquidas ou sólidas, que apresentam problemas de saturação de sinal. O espectro obtido do xileno comercial está apresentado na figura 50, juntamente com o espectro do nujol.

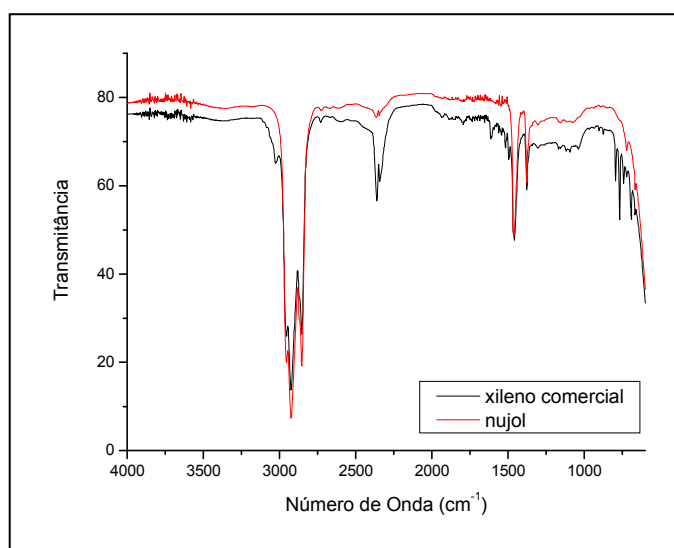


FIGURA 50 – ESPECTRO DE INFRAVERMELHO DO XILENO COMERCIAL EM CÉLULA DE NaCl COM NUJOL

A figura 50 mostra que o sinal analítico melhorou consideravelmente, não ocorrendo mais a saturação de sinal, porém não apareceram os picos abaixo de 2000 cm^{-1} , que usualmente contém muita informação analítica, levando à suspeita de interferência de sinal devido ao diluente. Com isto obteve-se o espectro somente do nujol e observou-se que havia uma grande interferência do mesmo na região de $2700\text{-}3100\text{ cm}^{-1}$, impossibilitando uma análise detalhada das deformações axiais de C-H característicos desta região. O sinal analítico também estava prejudicado em outras regiões tais como em 1500 cm^{-1} e abaixo de 1000 cm^{-1} . Sendo assim, descartou-se a técnica de diluição com o nujol.

Para resolver os problemas apresentados anteriormente, realizaram-se novas medidas em módulo de ATR (Refletância Total Atenuada). Os espectros obtidos por este novo modo de análise, estão apresentados na Figura 51. Observe-se que não existe mais a saturação do sinal nas regiões anteriormente

mencionadas. Além disso, houve uma grande melhora na resolução dos picos no espectro inteiro.

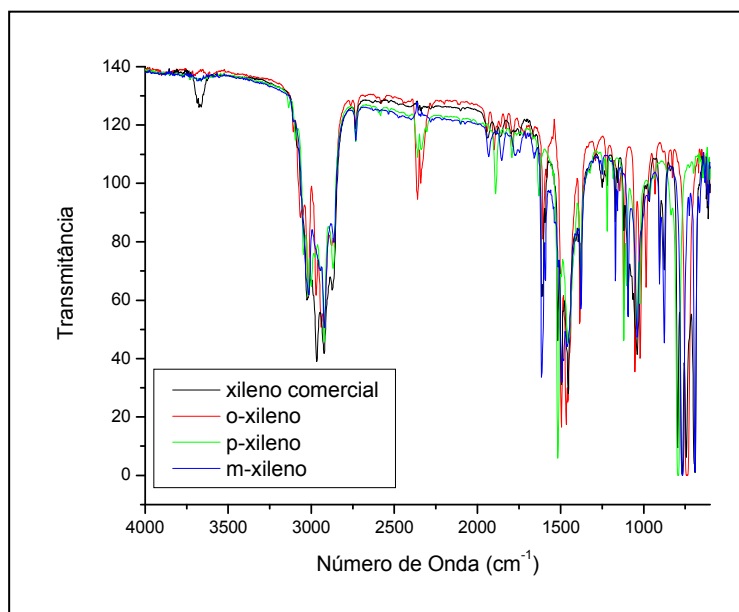


FIGURA 51 – ESPECTRO DE IV COMPARATIVO DE XILENOS EM CÉLULA ZnSe POR ATR.

Sendo assim, a técnica de ATR em célula de ZnSe revelou-se a mais precisa dentre as técnicas testadas anteriormente (célula de CaF e mistura com nujol) porque permitiu a visualização total das bandas características dos xilenos. Portanto, a técnica ATR pode ser utilizada para obtenção de espectros bem resolvidos de compostos complexos, como a gasolina, e seus espectros podem ser processados para calibração multivariada.

6.1.2 Atribuições de bandas no IV

Analisando as bandas de IV apresentadas na figura 52, a presença do etanol está indicada em 3339 cm^{-1} em razão da deformação axial assimétrica do grupo OH, enquanto que em 1454 cm^{-1} ocorrem deformações angulares assimétricas fora do plano do grupo OH, e também em 1051 cm^{-1} e 1090 cm^{-1} ocorrem deformações axiais entre as ligações C-O. Como o etanol possui grupamentos CH_3 e CH_2 , ocorre deformação axial assimétrica em 2957 cm^{-1} e 2926 cm^{-1} respectivamente e deformação axial simétrica do grupo CH_3 em 2872 cm^{-1} .

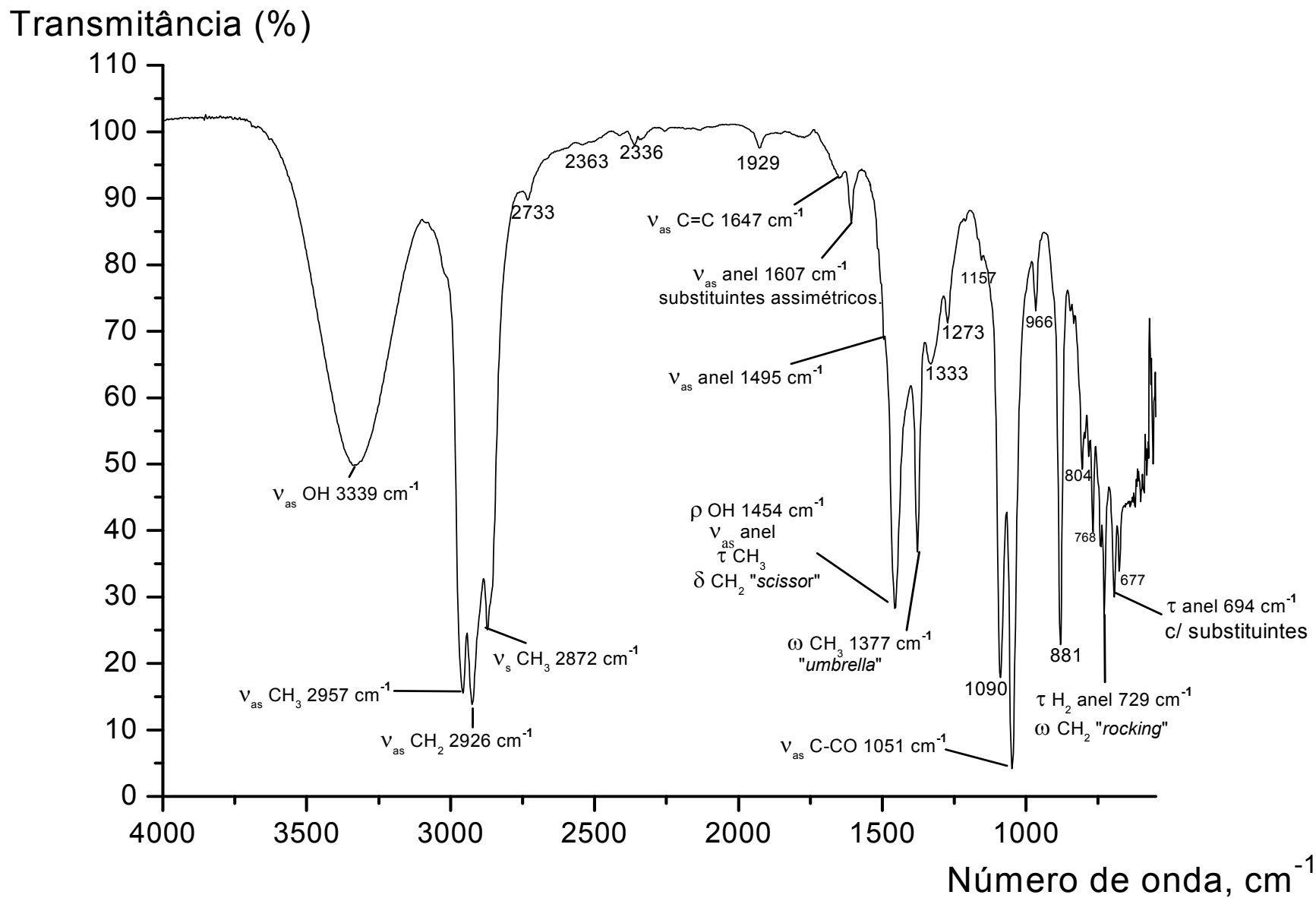


FIGURA 52 – INTERPRETAÇÃO DO ESPECTRO NO INFRAVERMELHO MÉDIO DE GASOLINA AUTOMOTIVA

NOTA: δ - deformação angular simétrica no plano. / ω - deformação angular simétrica fora do plano.

ρ - deformação angular assimétrica no plano. / τ - deformação angular assimétrica fora do plano.

ν_{as} - deformação axial assimétrica. / ν_{s} - deformação axial simétrica

A presença dos grupos parafínicos, naftênicos e isoparafínicos está indicada em 2872 cm^{-1} devido à deformação axial simétrica do grupo CH_3 . Ocorrem também deformações axiais assimétricas em 2926 cm^{-1} para o grupo CH_2 e 2957 cm^{-1} para o grupo CH_3 . Em 1454 cm^{-1} ocorre deformação angular assimétrica fora do plano para o grupo CH_3 e deformação angular simétrica no plano para o grupo CH_2 . Em 1377 cm^{-1} ocorre deformação angular simétrica fora do plano (do tipo *umbrella* ou guarda-chuva) para o grupo CH_3 e para o grupo CH_2 em 729 cm^{-1} do tipo *rocking* (rotação). Observa-se que os três grupos funcionais influenciam as mesmas regiões do espectro e uma análise multivariada é primordial para que se obtenha bom ajuste na modelagem.

Quanto aos olefínicos, tem-se indicativos em 1647 cm^{-1} devido à deformação axial assimétrica da ligação $\text{C}=\text{C}$ e esta banda parece ser a única representativa e exclusiva desta função química. Porém ocorrem bandas em 2872 cm^{-1} devido à deformação axial simétrica do grupo CH_3 . Ocorrem também deformações axiais assimétricas em 2926 cm^{-1} para o grupo CH_2 e 2957 cm^{-1} para o grupo CH_3 , pois seus substituintes são os mesmos dos isoparafínicos. Outros sinais específicos de ligações insaturadas estão encobertos pelas bandas de outras funções.

Com relação aos aromáticos, apresentam bandas em 1495 cm^{-1} devido à deformação axial assimétrica do anel benzênico. Em 1607 cm^{-1} a mesma deformação ocorre devido à presença de anel benzênico com substituintes assimétricos. Ocorre uma deformação axial assimétrica do anel aromático em 1454 cm^{-1} . Em números de onda mais baixos tem-se deformação angular assimétrica fora do plano em 694 cm^{-1} devido à presença de anel com substituintes e em 729 cm^{-1} devido aos hidrogênios do anel benzênico.

As atribuições acima explanadas estão fundamentadas de acordo com outros autores (COATES, 2000; MAYO, MILLER e HANNAH, 2003; SILVERSTEIN e WEBSTER, 1998; STUART, 2004) para confirmação dos principais picos existentes. A tabela 9 apresenta um resumo das bandas explicadas neste trabalho. Contudo, pode-se concluir que o espectro infravermelho das amostras de gasolina contém informações que representam todos os grupos químicos existentes na gasolina. Estas informações são representativas de cada amostra e podem fornecer variáveis importantes para a montagem de correlações matemáticas.

TABELA 07 – RESUMO DAS ATRIBUIÇÕES DE BANDAS NO IV PARA A GASOLINA

Nº de onda (cm ⁻¹)	Tipo de deformação	Grupo funcional presente na gasolina
3339	axial assimétrica	Álcool (exclusiva e não coincidente)
2957	axial assimétrica (grupo CH ₃)	Álcool, parafínico, isoparafínico, naftênico, olefínico, aromático
2926	axial assimétrica (grupo CH ₂)	Álcool, parafínico, isoparafínico, naftênico, olefínico, aromático
2872	axial simétrica (grupo CH ₃)	Álcool, parafínico, isoparafínico, naftênico, olefínico, aromático
1647	axial assimétrica	Olefínico (exclusiva e não coincidente)
1607	axial assimétrica	Aromático (exclusiva e não coincidente)
1495	axial assimétrica	Aromático (exclusiva e não coincidente)
1454	axial assimétrica angular assimétrica no plano	Aromático Álcool
1454	angular assimétrica fora do plano angular simétrica no plano	Álcool, parafínico, isoparafínico, naftênico, olefínico
1377	angular simétrica fora do plano (grupo CH ₃ - <i>umbrella</i>)	Álcool, parafínico, isoparafínico, naftênico, olefínico
1090	axial assimétrica	Álcool (exclusiva e não coincidente)
1051	axial assimétrica	Álcool (exclusiva e não coincidente)
729	angular assimétrica fora do plano angular simétrica fora do plano	Aromático Álcool, parafínico, isoparafínico, naftênico
694	angular simétrica fora do plano	Aromático (exclusiva e não coincidente)

NOTA: Vide tabela 02, página 18.

6.2 Técnicas Instrumentais Analíticas para Identificação Detalhada de Compostos Presentes na Gasolina

O programa DHA consegue identificar a grande maioria dos compostos mais significativos, porém não estão catalogados em sua biblioteca os compostos nitrogenados e sulfurados, bem como alguns picos olefínicos e aromáticos. A quantidade de desconhecidos em uma amostra com características normais atinge aproximadamente 8% (v/v). Atualmente não é difícil detectar entre 500 a 600 picos em uma amostra de gasolina típica, porém são identificados aproximadamente 200. Um exemplo do relatório gerado pelo programa DHA está apresentado na figura 53 e mostra os principais grupos químicos presentes na gasolina.

Varian Detailed Hydrocarbon Analysis * Version 5.5*** S/N 00133**
 Analysis File: C:\Star\data\Lil\rede neural\ps12507_02-08-02_15:27:59 .run
 Calibration File C:\Star\data\Lil\rede neural\ps12507_02-08-02_15:27:59 .run
 Operator: Lilian Instrument: Varian Star #1 Channel: Front
 Sample Name: PS12507 Inject Time: 02/08/02 15:27:58
 AutoSampler Report:
 Sample Notes:

Hydrocarbon Totals by Group Type

Type	Wt %	Vol %	Mol %
Total Aromatics	16,616	14,146	10,951
Total Iso-Paraffins	13,990	15,484	11,157
Total Naphthenes	12,600	12,258	9,534
Total Olefins	12,420	13,707	12,091
Total Oxygenates	26,377	25,048	43,570
Total Paraffins	9,335	10,379	7,676
Total Unknowns	8,662	8,978	5,022
Total:	100,00	100,00	100,00

FIGURA 53 – RELATÓRIO GERADO PELO PROGRAMA DHA DE UMA GASOLINA COMUM QUE ESTÁ DENTRO DAS ESPECIFICAÇÕES DA ANP.

Um passo inicial para identificar substâncias desconhecidas na gasolina foi confirmar algumas substâncias por injeção direta de padrões puros existentes em laboratório. Injeta-se o padrão nas mesmas condições cromatográficas da amostra e comparam-se os tempos de retenção, que deverão ser iguais. Os padrões analisados foram: pentano, hexano, heptano, isoctano, 2,2-dimetilbutano, benzeno

e tolueno. Todos estes padrões confirmaram a identificação prévia feita pelo método DHA. Em seguida injetou-se uma mistura de referências da SupelcoTM, adquirido para confirmar outros compostos presentes na gasolina. Com isto, outros 80 picos foram confirmados.

Tendo-se identificado muitos picos por comparação, quantificou-se uma amostra de gasolina de maneira a confirmar a identificação automática do DHA. Como o DHA utiliza o cromatograma obtido por GC-FID, é importante salientar que este cromatograma apresentou os mesmos picos que a corrida no CG-EM. Iniciou-se então a comparação da mesma amostra injetada no CG-EM, confrontando o espectro de massas com as substâncias identificadas pela biblioteca do DHA, observando-se a semelhança entre os cromatogramas e se o pico nomeado correspondia à função química no espectro de massas.

Ao encontrar em literatura as normas ASTM D6729-04 e D6730-01, aproveitou-se também as bibliotecas apresentadas (estavam com um maior número de substâncias possíveis do que o usado pelo DHA). Confirmou-se novamente a maioria das substâncias e outras ainda não identificadas pela ordem de eluição e por espectrometria de massas.

Finalmente identificou-se a função química e o número de carbonos de outras substâncias que não foram identificadas nos passos anteriores, utilizando-se as técnicas auxiliares de espectrometria de massas e de ionização química. Com este procedimento, o teor de desconhecidos baixou de 8%(v/v) para 2,5%(v/v) em média. A figura 54 apresenta o relatório DHA de uma gasolina comum, que está dentro das especificações da ANP, e mostra que houve uma significativa redução no teor de desconhecidos e aumento no teor de aromáticos e olefínicos.

Em resumo, foram identificadas 290 substâncias por comparação com as normas ASTM, banco de dados do DHA e compostos puros, com apoio complementar dos espectros de massas e ionização química. Salienta-se que diversas amostras de gasolina comum e aditivada foram estudadas por CG-EM e todas apresentaram o mesmo perfil cromatográfico, com as mesmas substâncias, variando-se apenas a quantidade de cada composto. Foram nomeados 90 compostos desconhecidos, sendo que a maioria dos compostos eram aromáticos e olefínicos. A seqüência de eluição dos compostos está apresentada no apêndice D, que foi gravado no formato .pdf em mídia digital, visando diminuir o impacto ambiental que seria gerado na impressão de 600 páginas.

Varian Detailed Hydrocarbon Analysis *** Version 5.5*** S/N 00133			
Analysis File: C:\Documents and Settings\Lilian\Meus documentos\doutorado\amostras\			
Calibration File C:\Documents and Settings\Lilian\Meus documentos\doutorado\amostras\			
Operator: Lilian	Instrument: Varian Star #1	Channel: Front	
Sample Name: GC39	Inject Time: 14/9/2005 02:43:36		
AutoSampler Report: Vial: 3	Injection Number: 1	Volume: 1.0 uL	Position: 1
Sample Notes:			
<hr/>			
Hydrocarbon Totals by Group Type			
<hr/>			
Type	Wt %	Vol %	Mol %
Total Aromatics	18,951	15,954	12,243
Total C14+	0,294	0,291	0,108
Total Iso-Paraffins	14,738	16,560	11,970
Total Naphthenes	13,466	13,083	10,132
Total Olefins	13,891	15,102	13,390
Total Oxygenates	26,173	25,073	42,329
Total Paraffins	10,198	11,536	8,503
Total Unknowns	2,288	2,401	1,325
Total:	100,00	100,00	100,00

FIGURA 54 – RELATÓRIO GERADO PELO PROGRAMA DHA DE OUTRA GASOLINA QUE ESTÁ DENTRO DAS ESPECIFICAÇÕES DA ANP, APÓS AJUSTE DA BIBLIOTECA PIANO.

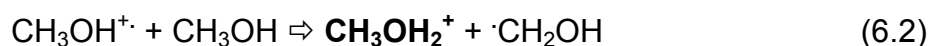
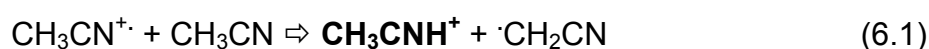
6.2.1 Ionização Química

Usando-se técnicas de ionização leve, como na ionização química com íons positivos, o íon $[M+H]^+$ é mais observado em compostos insaturados, enquanto que o íon $[M-H]^+$ é observado em compostos saturados (HOFFMANN and STROOBANT, 2002, p.).

De fato, quase todos os compostos olefínicos e aromáticos apresentaram a formação do íon $[M+1]^+$, seguindo a reação de transferência de próton, utilizando-se acetonitrila e metanol como agentes geradores dos íons reativos. Parece que estes compostos insaturados se comportaram como base de Bronsted (receptores de prótons) enquanto que o íon reativo é o ácido de Bronsted doando o próton. A dupla ligação da insaturação é capaz de estabilizar o próton recebido, gerando um

carbocátion suficientemente estável para não fragmentar dentro do *ion trap* e ser detectado no fotomultiplicador.

Um exemplo da classe de compostos olefínicos é o hex-3-eno (C_6H_{12}), cujo peso molecular é igual a 84. No espectro de ionização química com acetonitrila (figura 55) e com metanol (figura 56), este composto segue a reação de transferência de próton e produz o íon m/z $[M+1]^+ = 85$. Primeiro ocorre a formação do íon reativo dentro do *ion trap* para acetonitrila (reação 6.1) e metanol (reação 6.2), devido a colisões internas entre as moléculas do próprio reagente que está em excesso:



Em seguida ocorre a reação entre o íon reativo formado na reação anterior e a molécula do composto que entra no *ion trap*, gerando o carbocátion que é o único a ser detectado no final do processo de ionização química:

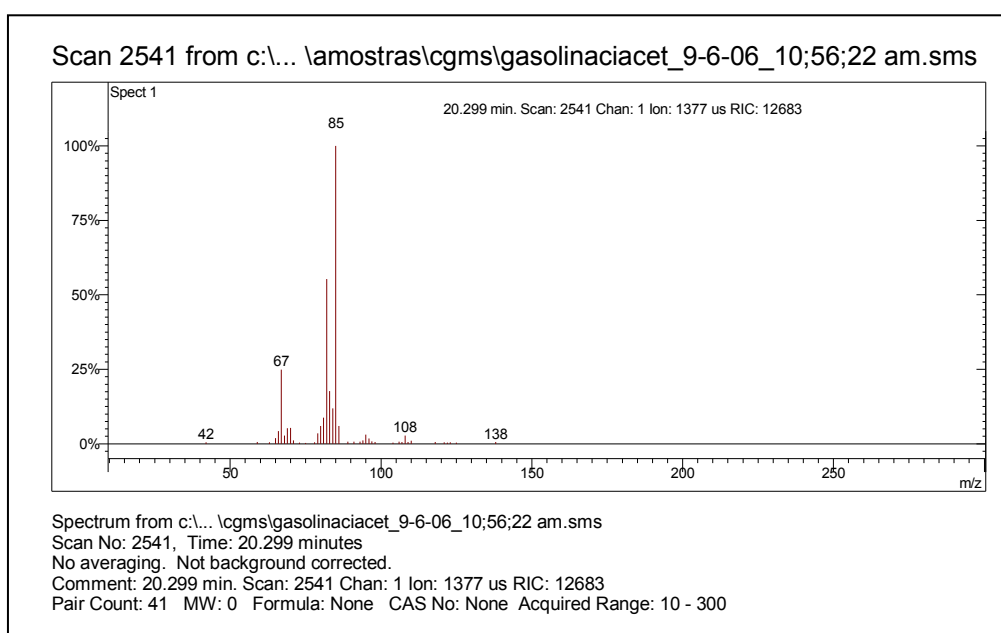
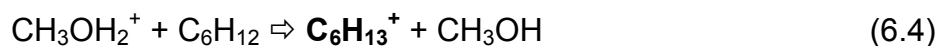


FIGURA 55 - IONIZAÇÃO QUÍMICA COM ACETONITRILA E (*E*)-HEX-3-ENO

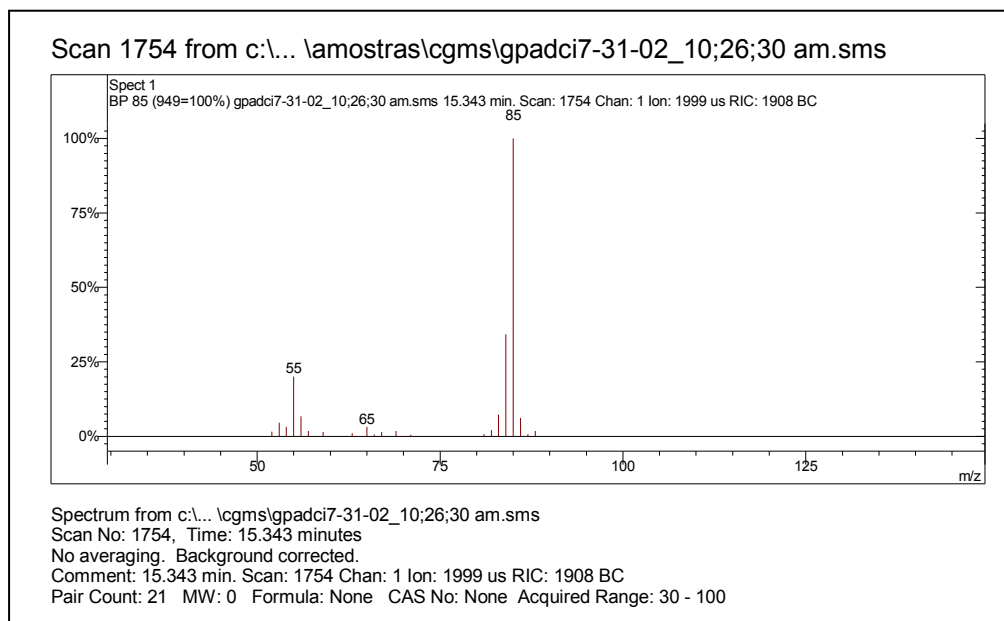
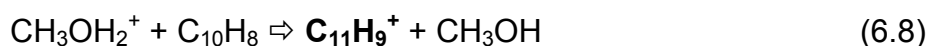
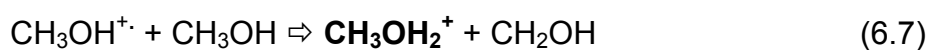
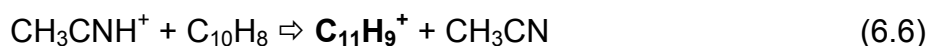
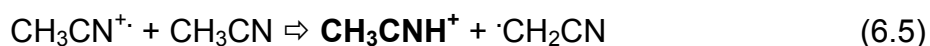


FIGURA 56 - IONIZAÇÃO QUÍMICA COM METANOL E (*E*)-HEX-3-ENO

Moléculas neutras não possuem carga e não conseguem viajar através do campo magnético até o detector. Os íons reativos e outros tipos de íons gerados a partir dos reagentes originais também não são detectados no espectro final, pois a sua estabilidade é pequena (por isso são denominados íons reativos). Portanto, no espectro final de ionização química, normalmente aparece somente o íon da molécula que se deseja estudar em máxima abundância relativa (100% no espectrograma). Outros íons em pequena abundância podem estar presentes, mas são resultados de reações com fragmentos não desejados.

O representante da classe dos aromáticos é o naftaleno ($C_{10}H_8$), com peso molecular igual a 128. Nota-se que a reação de transferência de próton acontece gerando o íon $[M+1]^+ = 129$, tanto com acetonitrila (figura 57), quanto com o metanol (figura 58):



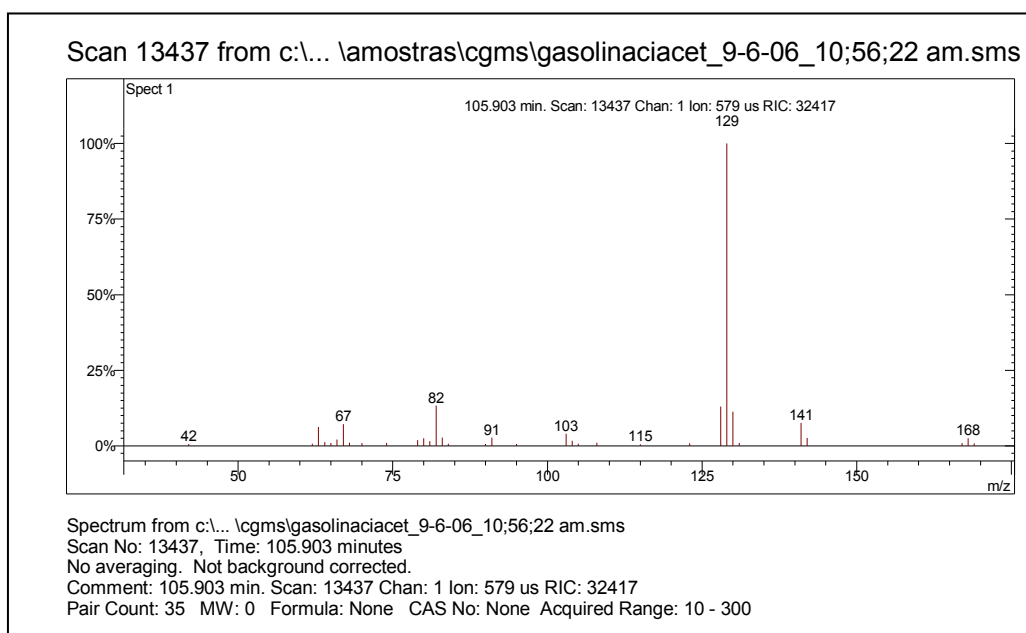


FIGURA 57 - IONIZAÇÃO QUÍMICA COM ACETONITRILA E NAFTALENO

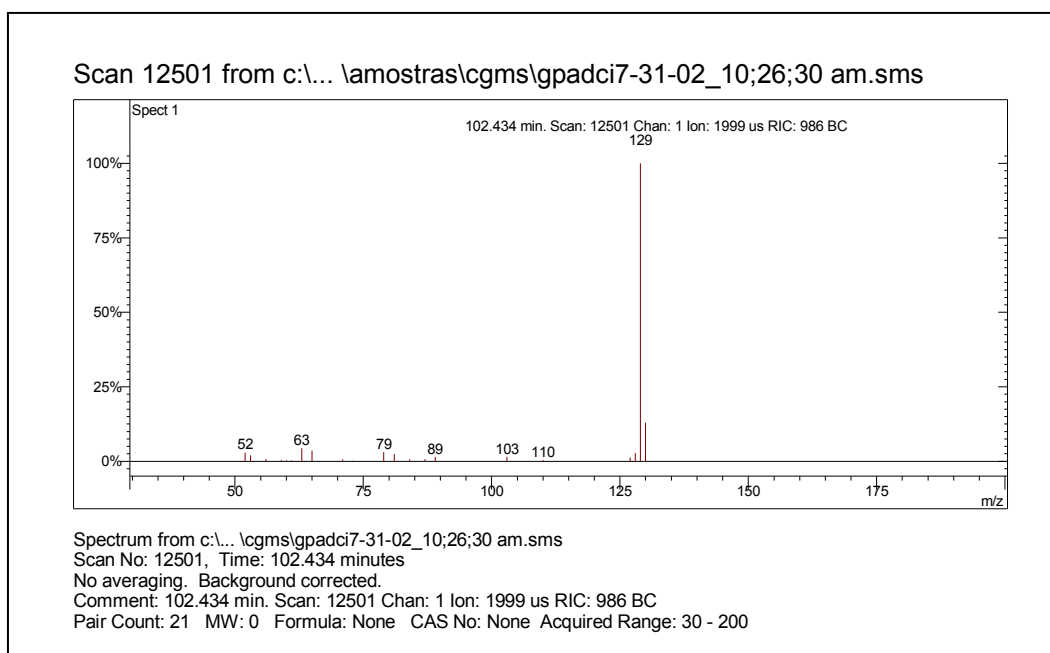


FIGURA 58 - IONIZAÇÃO QUÍMICA COM METANOL E NAFTALENO

A reação de transferência de próton não ocorreu da maneira esperada para aromáticos muito ramificados. Parece que os substituintes foram fragmentados apesar da baixa energia liberada na ionização química. Este comportamento foi observado principalmente em aromáticos com substituintes de cadeia longa, como por exemplo, o 3-metilbutilbenzeno (PM = 148; C₁₁H₁₆), apresentado na figura 59. A ionização química com acetonitrila produziu diversos fragmentos ao invés do

fragmento esperado $[M+1]^+ = 149$. Ele aparece no espectrograma, porém com baixa abundância relativa, e pode confundir o pesquisador fornecendo informações contraditórias (figura 60), como por exemplo identificar o pico de ionização química como sendo o fragmento $m/z = 82$, que é proveniente de *background* e não um composto presente na gasolina. Uma solução para que isto não aconteça seria diminuir a energia no *ion trap*, ou diminuir o tempo de reação química, porém, como a mistura é complexa, melhora-se o sinal para algumas funções químicas e piora-se o sinal para outras. Este comportamento instável não é tão significativo a ponto de invalidar a análise destas substâncias por ionização química. Vale a pena salientar que o mesmo pode indicar este tipo de molécula, ajudando na análise caso este problema seja conhecido previamente.

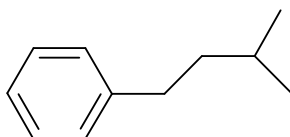


FIGURA 59 - 3-METILBUTILBENZENO

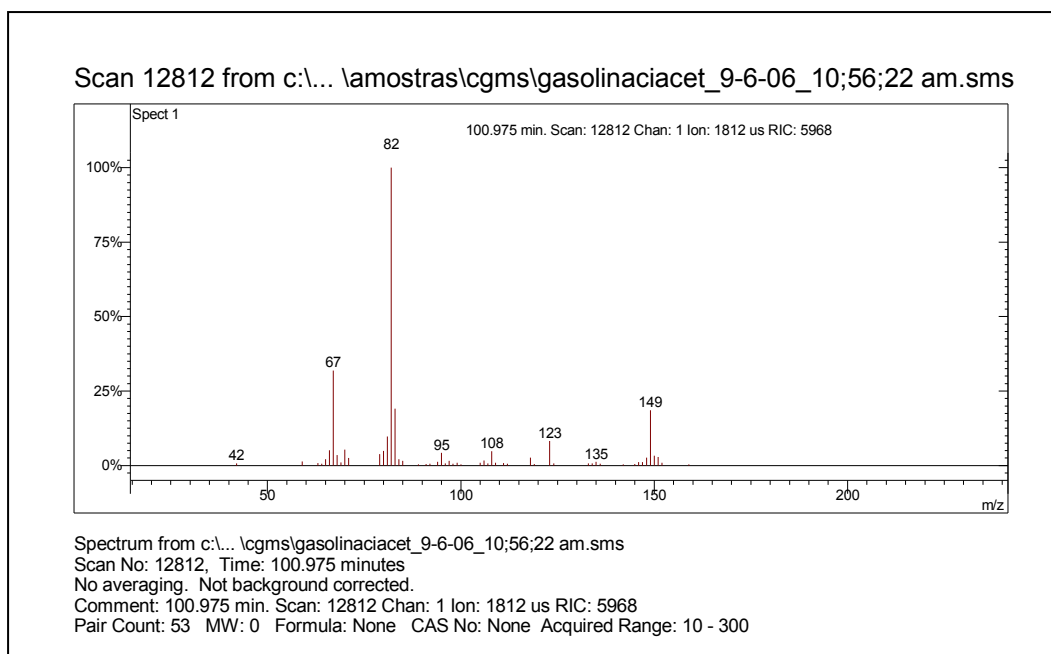


FIGURA 60 - IONIZAÇÃO QUÍMICA COM ACETONITRILA E 3-METILBUTILBENZENO

Alguns compostos olefínicos ou aromáticos não apresentaram o íon $[M+1]^+$, e sim o íon molecular $[M]^+$, seguindo a reação de transferência de carga. Um exemplo

disto é a reação da substância hex-1-eno (PM = 84, C₆H₁₂) com metanol, apresentado na figura 61.

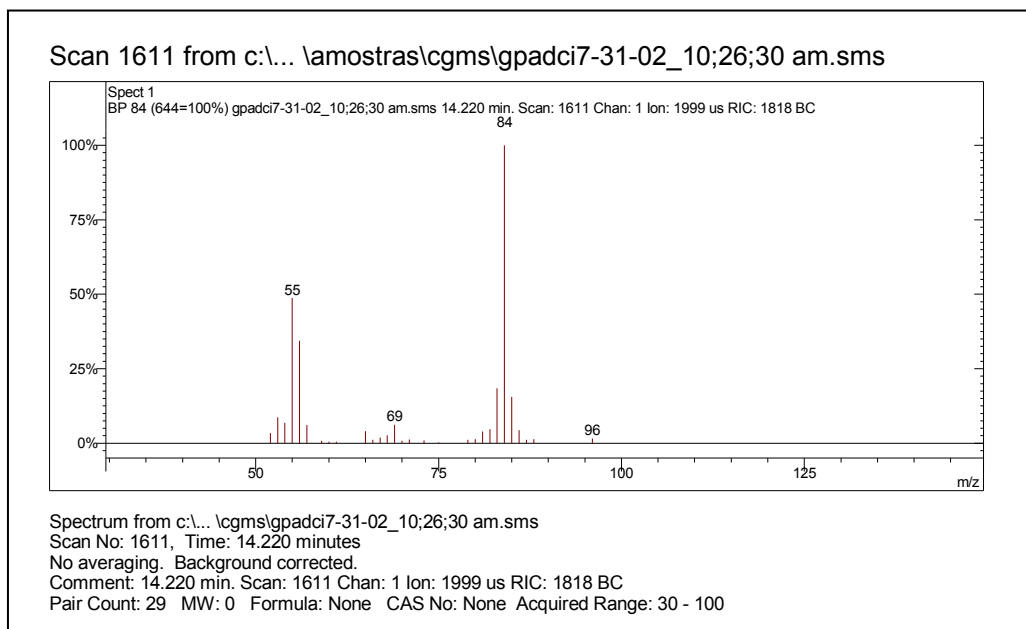
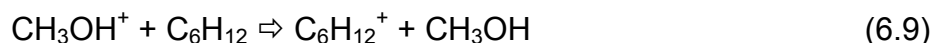


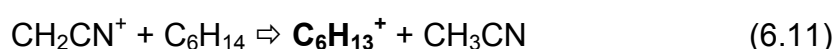
FIGURA 61 - IONIZAÇÃO QUÍMICA COM METANOL E HEX-1-ENO

A reação não foi favorável à formação do íon $[M+1]^+$, mas sim à formação do íon $[M]^+$. Conforme comparações dos resultados obtidos, observou-se que a estabilidade da ionização química poderia estar relacionada com o reagente utilizado, pois este tipo de comportamento ocorreu preferencialmente com o reagente metanol (probabilidade de 12 em 65 olefínicos; 4 em 82 aromáticos). A instabilidade aconteceu com acetonitrila também, porém com um número menor de ocorrências (6 em 65 olefínicos; 1 em 82 aromáticos). Ademais, notou-se que a quantidade da maioria dos compostos com este tipo de problema, era muito pequena na gasolina, sugerindo-se que a instabilidade da reação também estaria relacionada à quantidade insuficiente do composto a ser ionizado e a detecção do mesmo. Em busca por respostas na literatura especializada, encontrou-se que a reação de transferência de próton, bem como as outras reações da ionização química, possui termodinâmica própria e depende da energia interna das moléculas envolvidas para serem exotérmicas ou endotérmicas (LINDON; TRANTER e HOLMES, 2000, p. 207-215). Isto pode explicar os tipos de comportamento encontrados durante os diversos testes com ionização química.

Devido a escassez de bibliografia especializada em ionização química, muitas das observações aqui citadas estão fundamentadas em duas ou três análises realizadas neste estudo, seguindo as condições analíticas indicadas pelo fabricante do equipamento (Varian). Outro artigo (MONETI *et al.*, 1998) cita a formação de íons estabilizados por colisão em ionização química para acetonitrila e olefínicos de cadeia longa, porém observou-se que o tempo de ionização era menor (100 μ s) em relação a este estudo (2000 μ s). Quanto maior o tempo que os íons permanecem dentro do *trap*, maior a probabilidade de ocorrer o mecanismo de auto-ionização, no qual um íon pode transferir um próton para uma molécula não ionizada ao invés do íon molecular, aumentando a abundância do íon $[M+1]^+$. Segundo instruções de operação do fabricante (Varian), este problema da auto-ionização é comum em *ion trap* com ionização interna, que é o caso do presente trabalho. Sendo assim, é possível que as instabilidades de detecção observadas sejam provenientes deste outro mecanismo de ionização, inibindo a formação de íons estabilizados por colisão (vide exemplos de complexos formados por colisão nas páginas 115 e 116).

No total 65 olefínicos e 82 aromáticos apresentaram algum sinal de ionização química, porém 14 olefínicos e 6 aromáticos não apresentaram sinal algum. Em uma investigação no banco de dados final (todo o apêndice D) observou-se que a quantidade das substâncias que não apresentaram sinal era desprezível, portanto, não existindo quantidade suficiente de um dos produtos da reação para que ela ocorresse.

Por outro lado, parafínicos, isoparafínicos e naftênicos apresentaram íon $[M - 1]^+$, seguindo a reação de abstração de hidreto. Os compostos saturados se comportaram como ácido de Bronsted (doadores de prótons) enquanto que o íon reativo é a base que recebe o próton. Utilizando-se como exemplo da classe dos parafínicos, o hexano (PM = 86, C₆H₁₄) produziu o íon $[M-1]^+ = 85$ utilizando-se a acetonitrila (figura 62) e metanol (figura 63):



A reação 6.10 demonstra a formação do íon reativo da acetonitrila para o caso de abstração de hidreto. Este íon reativo retira um hidrogênio da molécula de

hexano, conforme reação 6.11, liberando uma molécula neutra de acetonitrila. As reações 6.12 e 6.13 demonstram o mesmo mecanismo para o metanol:

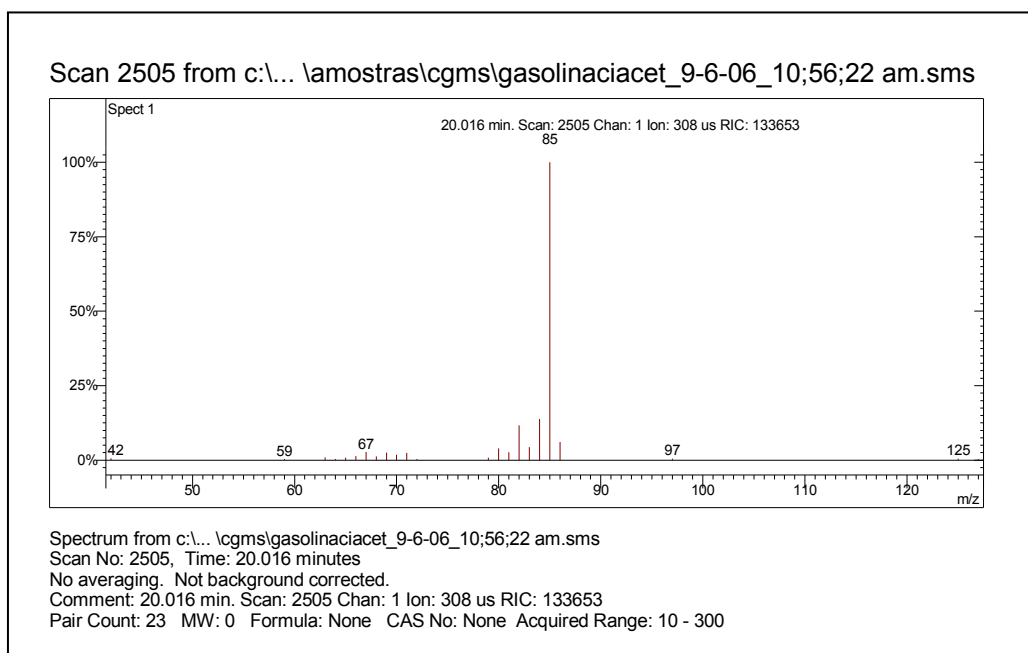
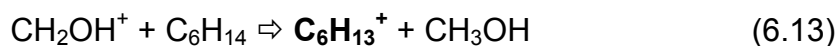


FIGURA 62 - IONIZAÇÃO QUÍMICA COM ACETONITRILA E HEXANO

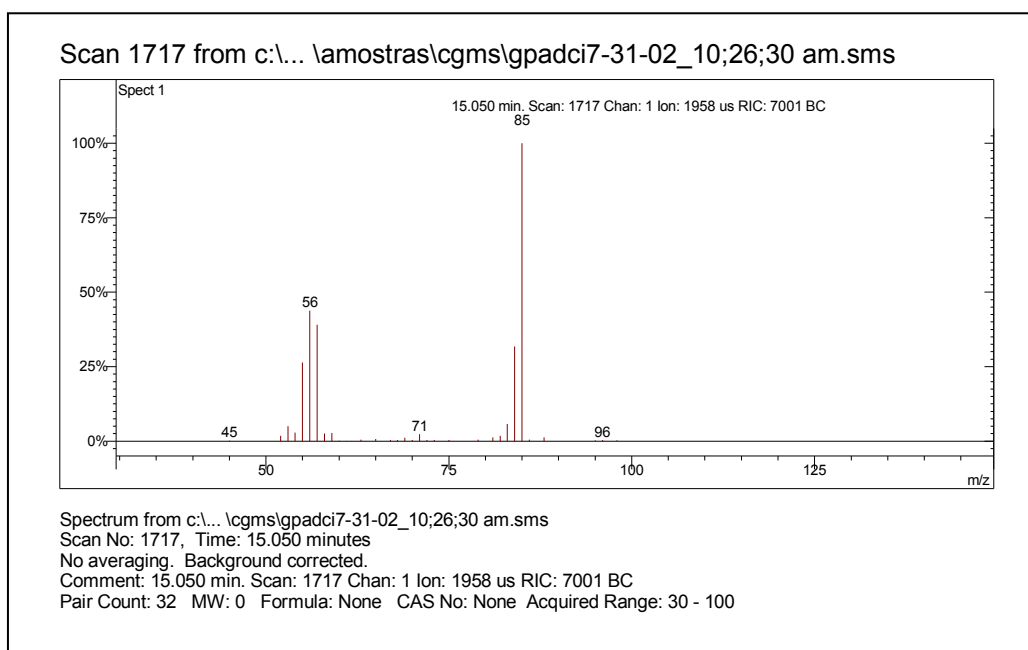


FIGURA 63 - IONIZAÇÃO QUÍMICA COM METANOL E HEXANO

De acordo com os dados colhidos neste estudo, observou-se que muitos compostos parafínicos não apresentaram ionização química, mesmo possuindo uma quantidade apreciável dentro da mistura. Por exemplo, do heptano (n-C₇) até o tetradecano (n-C₁₄) não apareceu nenhum sinal, enquanto que os parafínicos de menor cadeia carbônica apresentaram algum sinal. É possível que os parafínicos de cadeia longa necessitem de menor energia dentro do *ion trap* para se manterem estáveis, desta forma poderia ocorrer a reação de ionização.

Estão apresentados nas figuras 64 e 65 os espectros de ionização química do isopentano (PM = 72, C₅H₁₂), com acetonitrila e metanol respectivamente, gerando o íon [M-1]⁺ = 71, representando a classe dos isoparafínicos. As reações que descrevem a abstração de hidreto neste caso são:

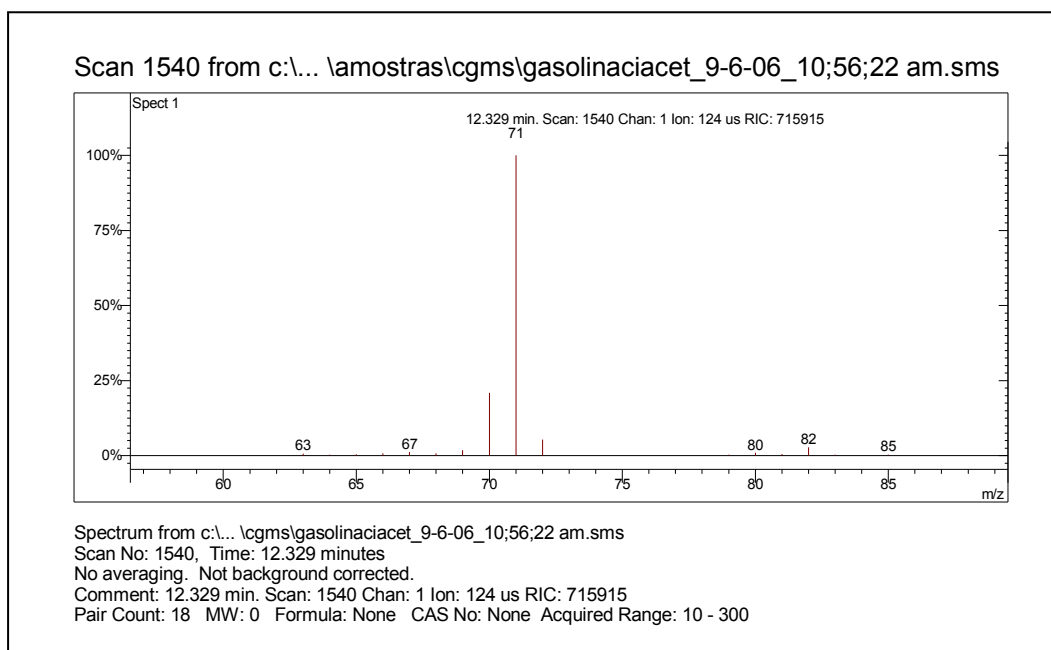
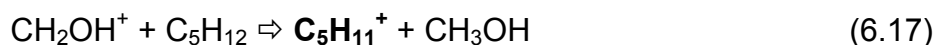
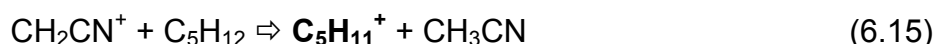


FIGURA 64 - IONIZAÇÃO QUÍMICA COM ACETONITRILA E ISOPENTANO

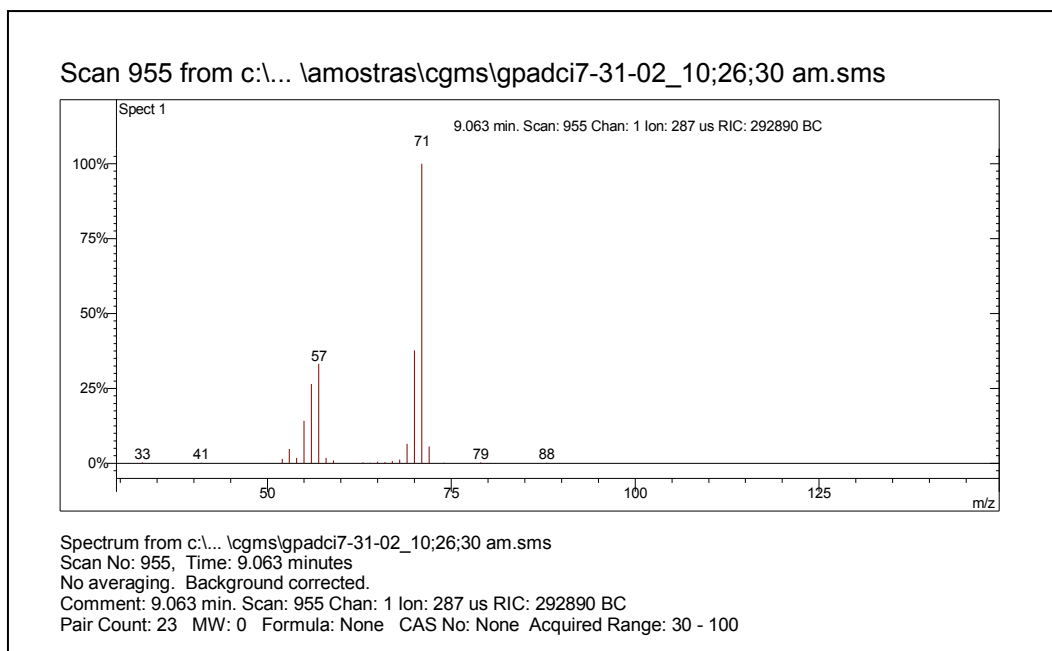
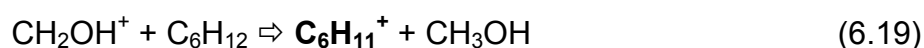
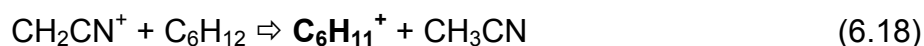


FIGURA 65 - IONIZAÇÃO QUÍMICA COM METANOL E ISOPENTANO

Nas figuras 66 e 67 estão apresentados os espectros de ionização química com acetonitrila e metanol do representante da classe dos naftênicos, o ciclohexano (PM = 84, C₆H₁₂). Também segue a reação de abstração de hidreto, apresentada a seguir, sem a reação da formação do íon reativo, que é o mesmo nas reações anteriores:



Naftênicos e isoparafínicos muito ramificados também apresentaram espectros de massas instáveis ou sem sinal. Trinta e sete isoparafínicos e vinte e quatro naftênicos não apresentaram nenhum sinal de ionização química, muitos deles apresentando quantidade apreciável dentro da gasolina. Percebeu-se com isto, que a formação do íon reativo para este caso estava sendo prejudicada, comparada aos casos de transferência de próton. A razão disso talvez seja a termodinâmica desfavorável no sistema, dentro do *ion trap*. A ionização depende da temperatura do gás, e ocorre conforme “pacotes de energia” sejam absorvidos. Por isso muitas substâncias não apresentaram sinal de ionização, porque não absorveram a quantidade necessária de energia (LINDON; TRANTER e HOLMES, 2000, p. 1010). Para resolver este problema, seria necessário alterar diversos

parâmetros no equipamento, tais como temperaturas, nível de energia, tempo de reação, etc. As tentativas seriam puramente empíricas e, ao ajustar o sistema para essas classes, estaria interferindo no sinal analítico das outras classes existentes.

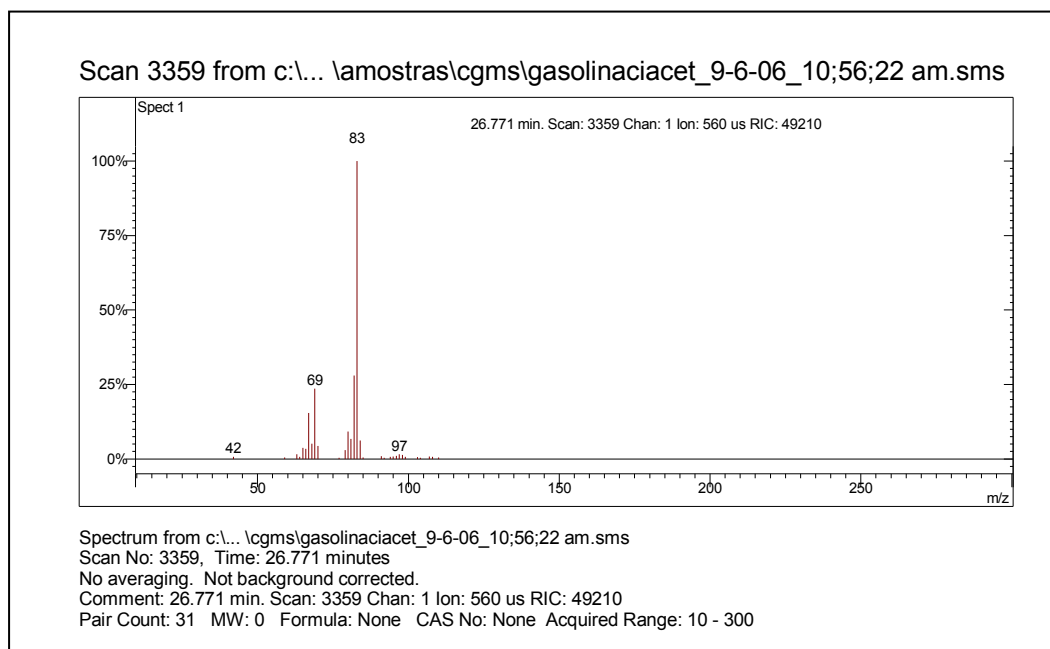


FIGURA 66 - IONIZAÇÃO QUÍMICA COM ACETONITRILA E CICLOEXANO

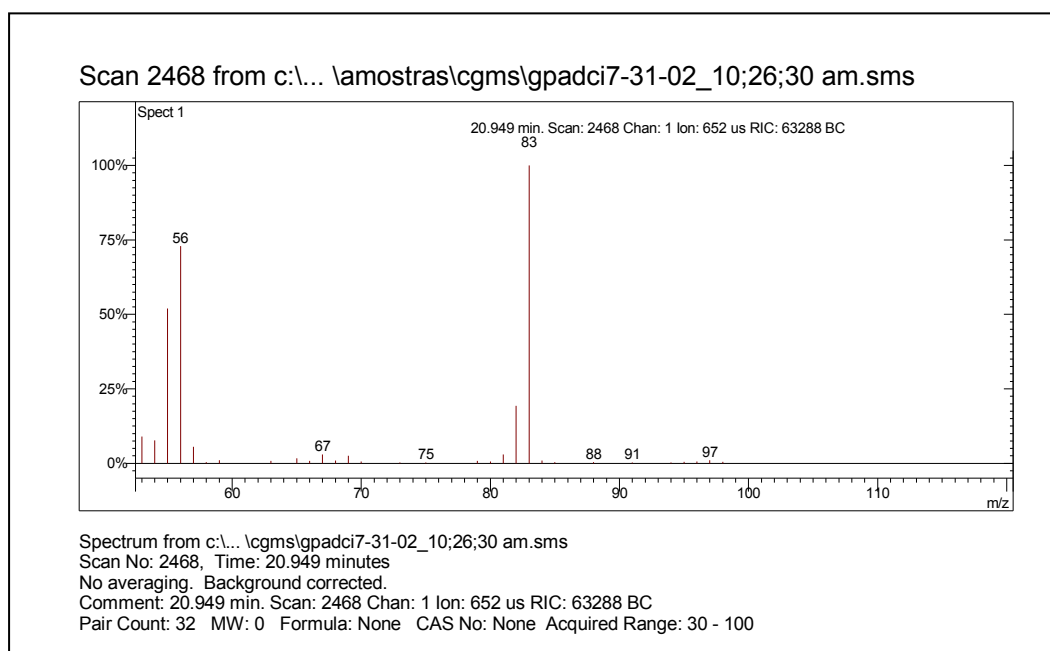


FIGURA 67 - IONIZAÇÃO QUÍMICA COM METANOL E CICLOEXANO

Ao comparar as três classes das substâncias saturadas, os naftênicos apresentaram o maior número de compostos apresentando a abstração de hidreto, que foi de 39 contra 11 dos isoparafínicos e apenas 3 dos parafínicos. Pode-se concluir também, que a estabilidade da molécula orgânica também ajuda na reação de ionização. Sabe-se que os naftênicos são quimicamente mais estáveis do que os isoparafínicos, que por conseguinte, são mais estáveis que os parafínicos.

Um exemplo importante, que não se encaixa nos três tipos de mecanismo de reação apresentados anteriormente, é o do etanol. As figuras 68 e 69 apresentam o espectro de ionização do mesmo com acetonitrila e metanol.

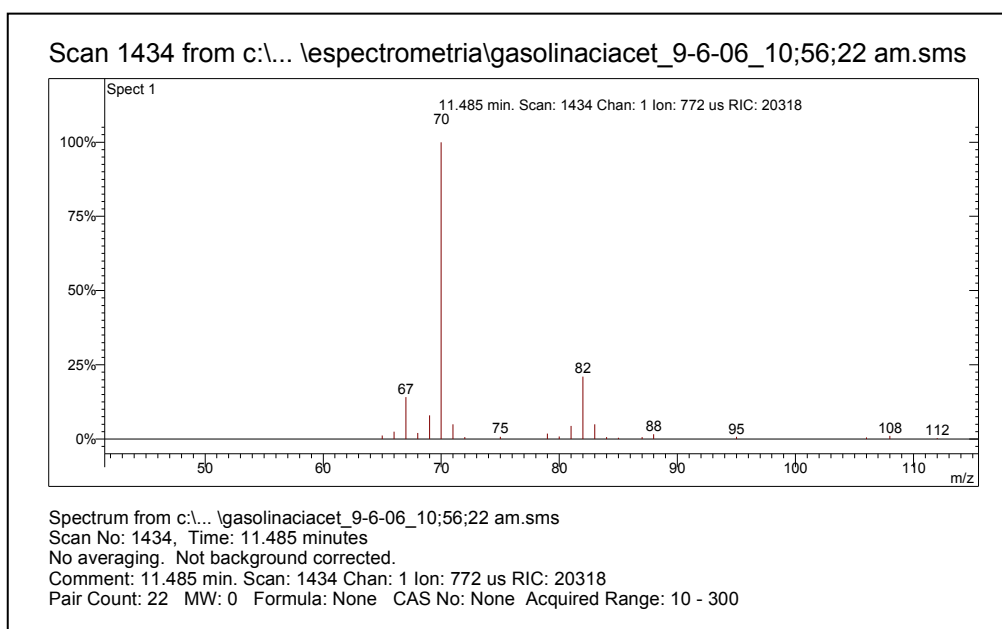
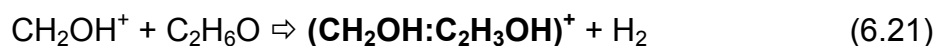
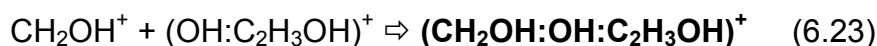
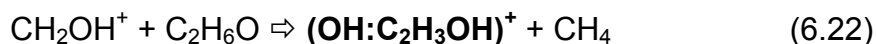


FIGURA 66 – IONIZAÇÃO QUÍMICA DO ETANOL COM ACETONITRILA

Observa-se nas duas figuras, que existe a formação de diversos fragmentos. O mais abundante é o mais significativo ($m/z = 70$ para acetonitrila e $m/z = 75$ para o metanol), e o que se conseguiu explicar, através da formação de complexos estabilizados, que é o quarto tipo de reação que pode ocorrer na ionização química com *ion trap*:



Observa-se que o íon reativo para este tipo de reação é o mesmo da reação por abstração de hidreto. Os fragmentos de massas $m/z = 67$ e 82 na ionização com acetonitrila são contaminantes do background, enquanto que os fragmentos de massa $m/z = 61$ e 92 podem ter formado outros íons respectivamente:



Deve-se salientar que os complexos formados estão explicados neste estudo sem fundamentação em mecanismos de reação e um estudo aprofundado deve ser executado para confirmação das hipóteses apresentadas nas reações de 6.20 a 6.23, o qual não é um dos objetivos deste estudo.

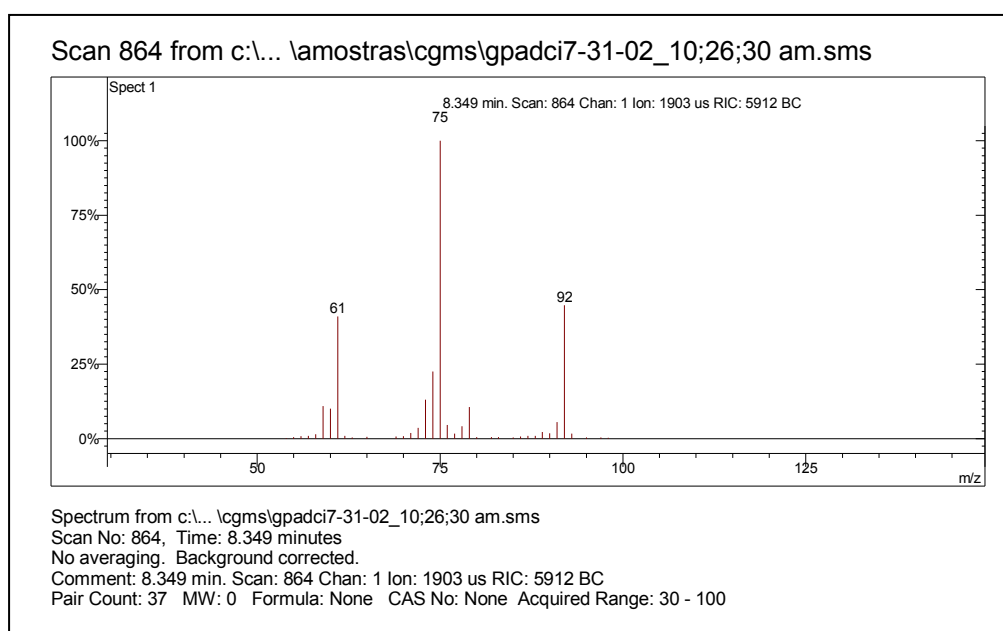


FIGURA 69 – IONIZAÇÃO QUÍMICA DO ETANOL COM METANOL
FONTE: A AUTORA (2002)

De um modo geral, a identificação da massa molecular da maioria dos compostos, apesar do comportamento instável em muitos casos, permitiu confirmar a função química de alguns compostos identificados e inferir sobre a estrutura possível de outros. A ionização química com acetonitrila foi mais eficaz que o metanol na maioria dos casos, mas ambos os reagentes podem ser usados para a confirmação dos compostos de uma mistura complexa.

6.2.2 Identificação dos Grupos Químicos por Espectros de Impacto de Elétrons

Esta ferramenta foi utilizada para confirmar a função química de cada composto presente na gasolina. Os fragmentos gerados por impacto de elétrons são as chaves da identificação funcional, pois observa-se algumas particularidades exclusivas de cada grupo químico. A identificação por espectrometria de massas de uma substância desconhecida, dentro de uma mistura, é bastante complexa, necessitando-se de algumas ferramentas auxiliares, tais como regras de fragmentação, comparação com outros espectros existentes em bibliotecas, e principalmente, a utilização de índices de retenção.

Um fenômeno comum que acontece na análise de combustíveis com CG-EM (cromatografia gasosa acoplada a espectrometria de massas) é que dois ou mais picos possuem espectros de massa muito similares, ou até idênticos. Porém possuem índice de retenção e natureza química diferentes (LAI; SONG, 1994, p. 1436). Exemplos de tais compostos são o (*E*)-pent-2-eno e (*Z*)-pent-2-eno, cujos espectros de massas estão apresentados nas figuras 70 e 71.

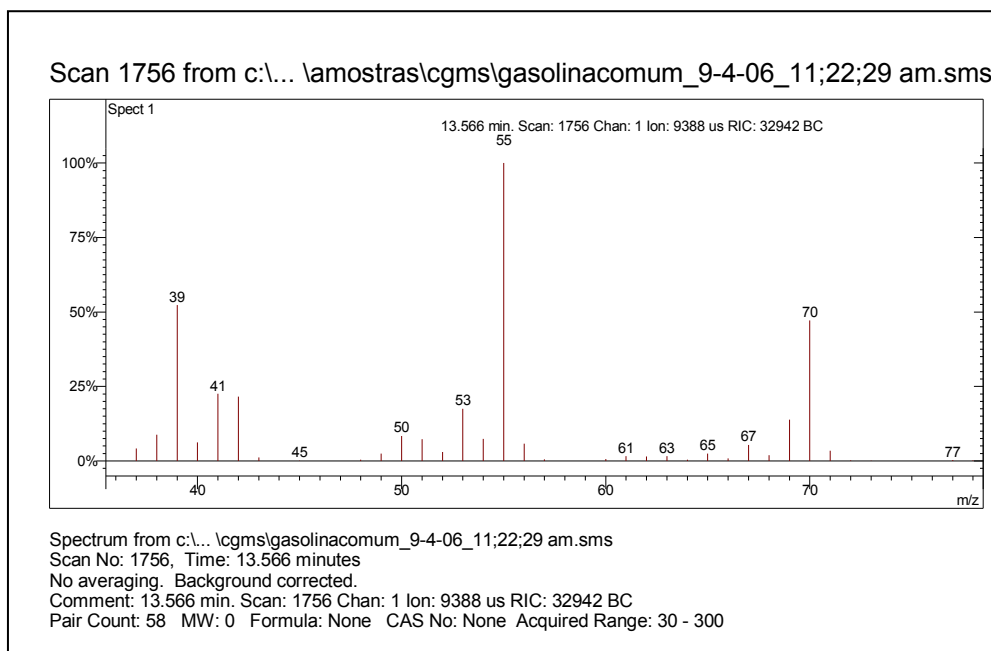


FIGURA 70 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO (*E*)-PENT-2-ENO

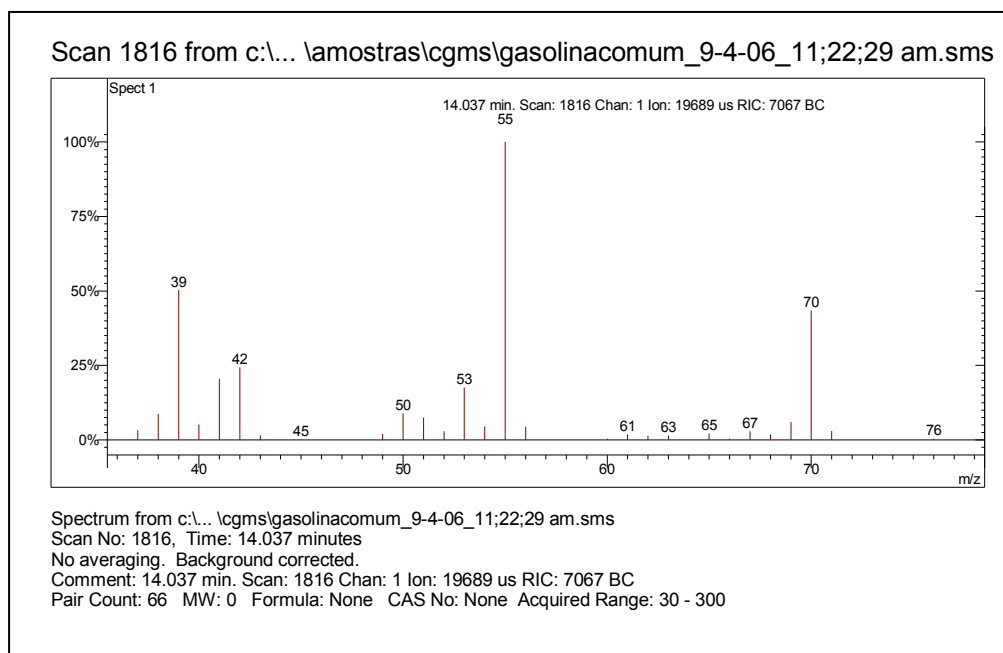


FIGURA 71 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO (Z)-PENT-2-ENO

Na identificação prévia realizada pelo programa DHA, os índices de retenção estão representados, já que o sistema automático de identificação fundamenta-se inteiramente nos mesmos. Portanto, pode-se afirmar que o composto (*E*)-pent-2-eno aparece antes de (*Z*)-pent-2-eno, porque na biblioteca PIANO do programa DHA, o primeiro possui índice de retenção menor que o segundo.

A simples comparação do espectro obtido experimentalmente, com o existente na biblioteca NIST, não foi eficiente na maioria dos casos. Observa-se as diferenças existentes nos espectrogramas de um mesmo composto, o 2,4-dimetileptano, apresentados nas figuras 72 e 73. Isto acontece porque a biblioteca NIST possui uma coleção de espectros de massas obtidos em diversos laboratórios do mundo, em equipamentos de marcas diferentes, e em condições analíticas diferentes. Na espectrometria de massas, existem diversos parâmetros que podem ser ajustados pelo analista, e estes influenciam no aspecto final do espectro dos compostos analisados. Cabe ao analista decidir, se o espectro obtido é mesmo apresentado pela biblioteca NIST, por índice de similaridade, e por outras ferramentas auxiliares como a ionização química, injeção do composto puro, etc.

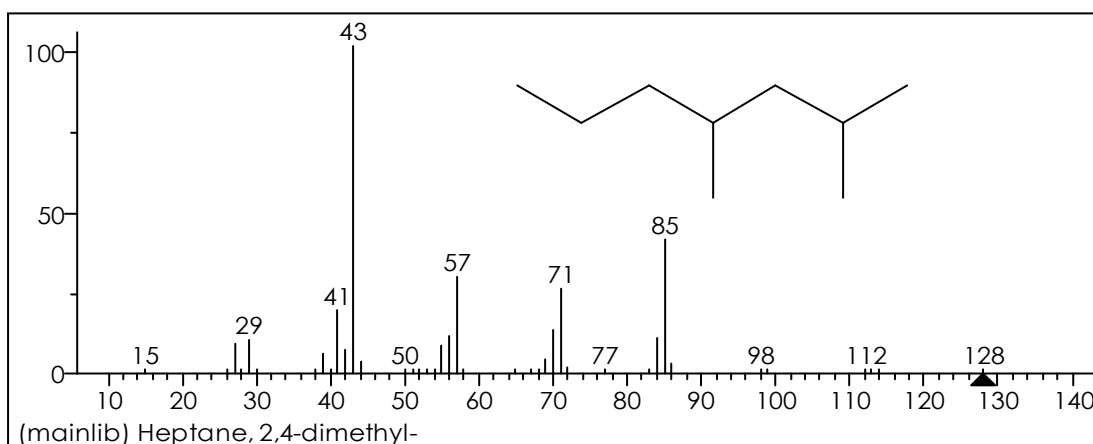


FIGURA 72 – ESPECTRO DE MASSAS DO COMPOSTO 2,4-DIMETILEPTANO APRESENTADO PELA BIBLIOTECA NIST

FONTE: NIST (2005)

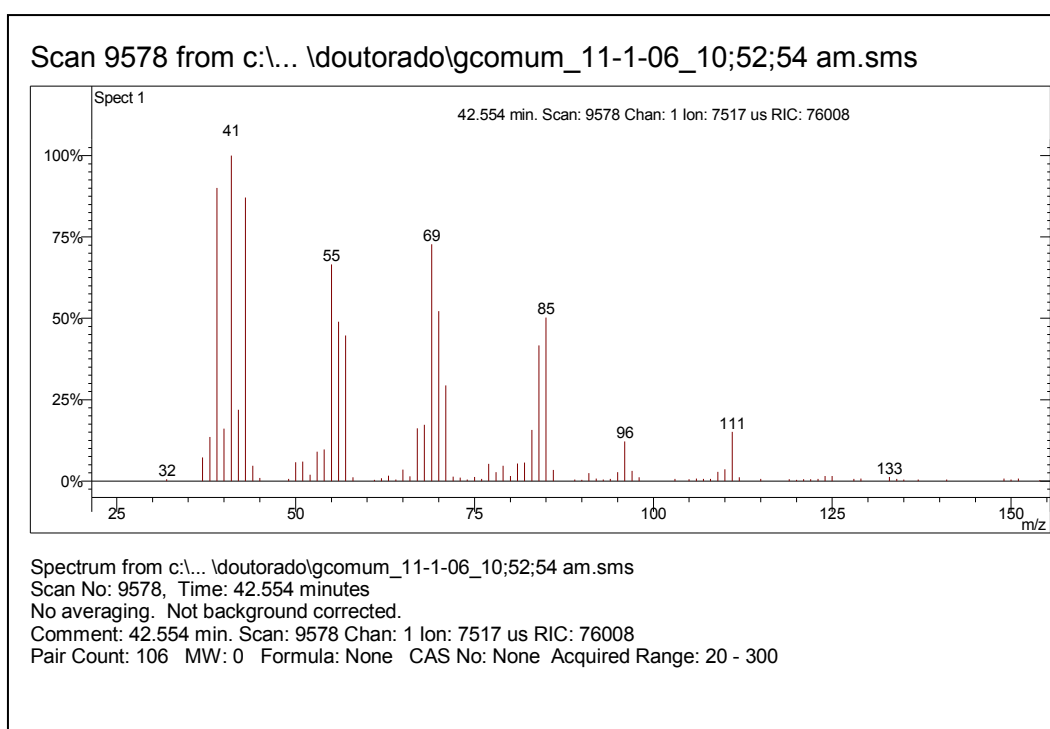


FIGURA 73 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO 2,4-DIMETILEPTANO OBTIDO EXPERIMENTALMENTE

O problema de comparação de espectros não invalida a identificação, desde que tomado o máximo de cuidados. Algumas vezes a comparação dos espectros torna-se uma ferramenta útil, quando os espectros são idênticos. As figuras 74 e 75 apresentam o espectrograma do composto tiofeno, identificado em uma das amostras de gasolina analisadas neste estudo. Sua presença na gasolina pode

ocorrer, já que existem substâncias sulfuradas na matéria-prima, porém não é desejada, por questões ambientais e proteção do motor.

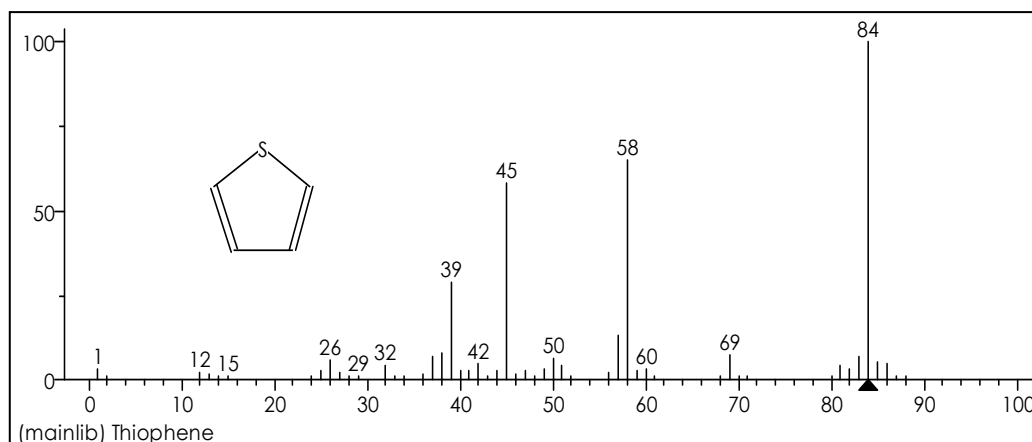


FIGURA 74 – ESPECTRO DE MASSAS DO COMPOSTO TIOFENO APRESENTADO PELA BIBLIOTECA NIST
 FONTE: NIST (2005)

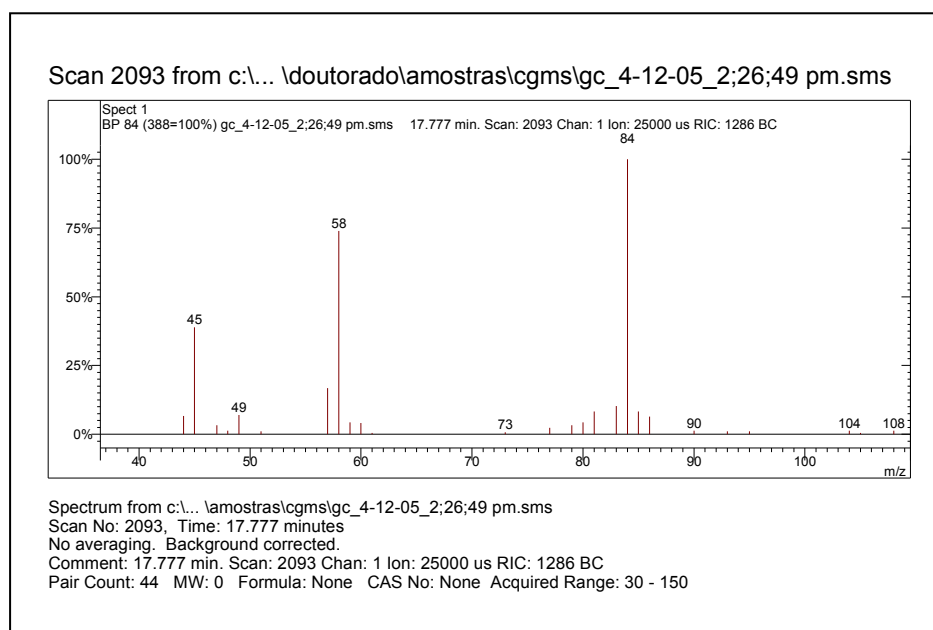


FIGURA 75 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO TIOFENO OBTIDO EXPERIMENTALMENTE

Outra substância não esperada, porém identificada por comparação com os espectros da NIST, foi um oxigenado, 1,1-dietoxietano (figuras 76 e 77). Como a presença deste composto não é esperada na gasolina, pode ser uma contaminação proveniente do álcool etílico hidratado (RAMOS; ANTONIOSI FILHO; 2005) e está em pequena quantidade (em nível de ppm), mas suficiente para uma identificação positiva.

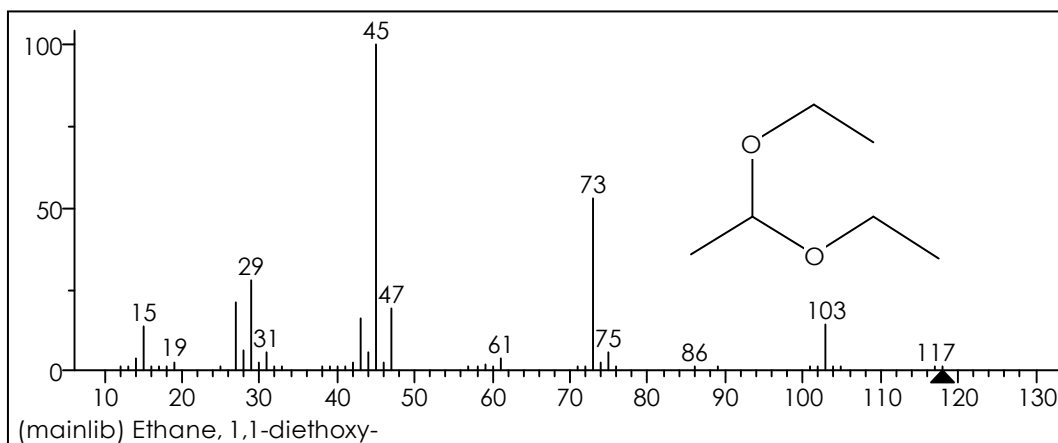


FIGURA 76 – ESPECTRO DE MASSAS DO COMPOSTO 1,1-DIETOXIETANO APRESENTADO PELA BIBLIOTECA NIST
 FONTE: NIST (2005)

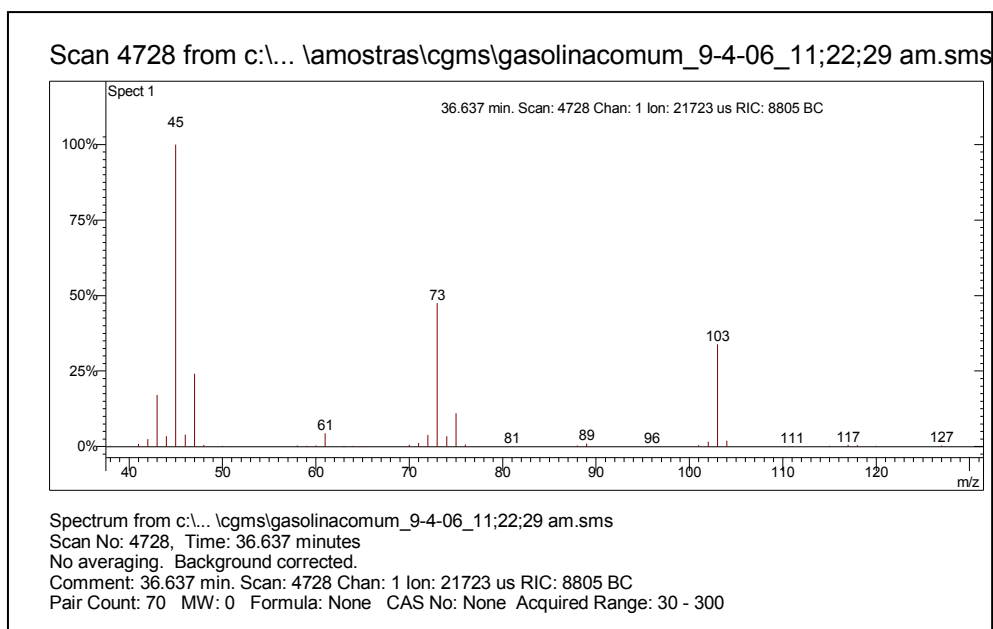


FIGURA 77 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO 1,1-DIETOXIETANO OBTIDO EXPERIMENTALMENTE

6.2.2.1 Grupo químico 1: parafínicos

Os parafínicos são fáceis de identificar à primeira vista, pois possuem características particulares, sendo a principal, a presença dos grupos de $m/z = 57$, correspondendo a fragmentos de 4 carbonos ($C_4H_9^+$), que normalmente é o pico base (abundância relativa 100%) e fragmentos de 3 carbonos ($C_3H_5^+$ ou $C_3H_7^+$) com $m/z = 41$ ou 43 . Os outros fragmentos de maior m/z diminuem (abundância relativa

fica menor) suavemente, com intervalos de 14 u. m (unidades de massa) indicando perda de CH_2 . O fragmento que corresponde à perda de metila é fraco ou inexistente. Observa-se a mesma fragmentação nos exemplos apresentados nas figuras 78 e 79 com diferença de um carbono entre o decano e o undecano.

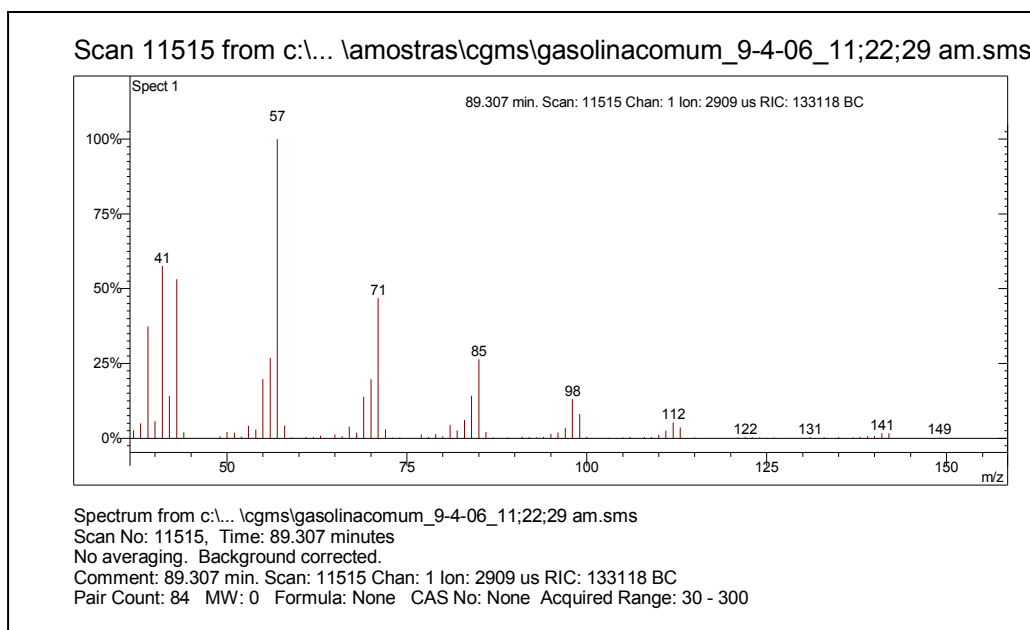


FIGURA 78 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO DECANO OBTIDO EXPERIMENTALMENTE

TABELA 08- INTERPRETAÇÃO DOS FRAGMENTOS DO COMPOSTO DECANO

Íon m/z	Fragmento	Observação
142 (ausente)	$[\text{M}]^+ = \text{C}_{10}\text{H}_{22}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
112	$\text{C}_8\text{H}_{16}^+$	Perda de etano.
98	$\text{C}_7\text{H}_{14}^+$	Perda de propano.
85	$\text{C}_6\text{H}_{13}^+$	Perda de butila.
71	$\text{C}_5\text{H}_{11}^+$	Perda de pentila.
57	C_4H_9^+	Fragmentação alílica.

Difícil mesmo foi identificar o íon molecular (equivale à massa molecular, mas com carga) da substância, já que a ionização química apresentou-se instável ou sem

sinal. Porém pode-se estimar o massa molecular pela seqüência de fragmentação. Observando a tabela 8 de interpretação dos fragmentos do decano, a única massa molecular possível para que ocorram todos os outros fragmentos é 142 ($C_{10}H_{22}$).

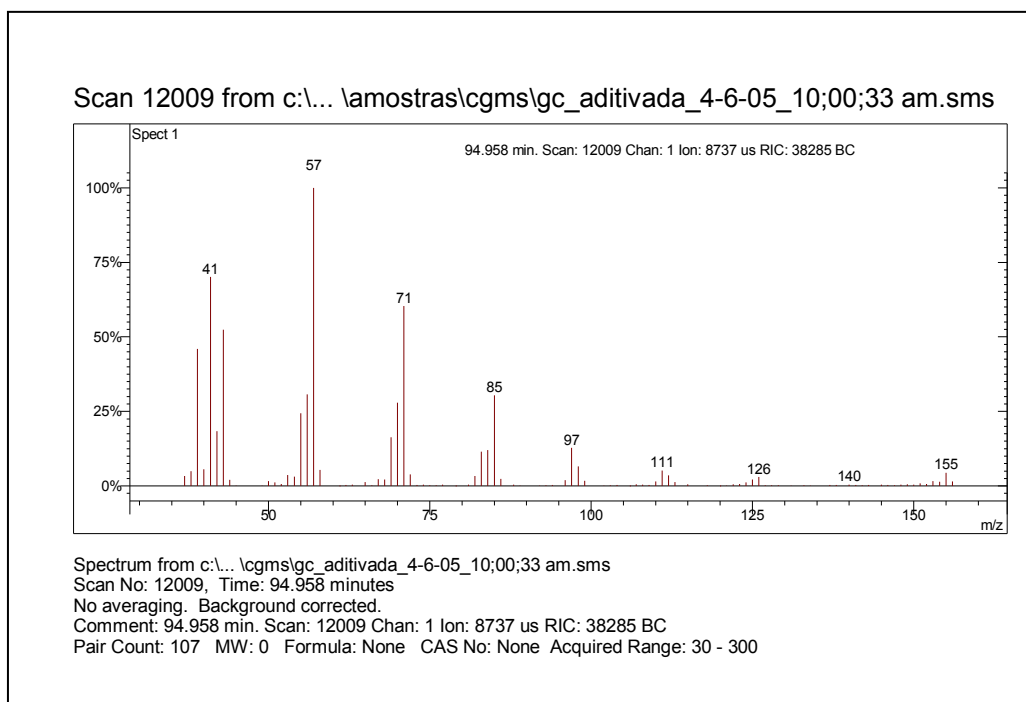


FIGURA 79 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO UNDECANO OBTIDO EXPERIMENTALMENTE

6.2.2.2 Grupo químico 2: isoparafínicos

Espectros dos isoparafínicos podem parecer idênticos aos parafínicos com o mesmo número de carbonos, porém isto acontece quando não há boa separação na cromatografia gasosa ou quando existe contaminação (*background*) dentro do *ion trap*. Dependendo do tamanho da cadeia carbônica e ramificações, além do número de ramificações, o espectro de um isoparafínico pode ser bastante complexo. Foi difícil encontrar o íon molecular, a ionização química apresentou-se instável e a comparação com espectros da NIST não foi eficiente, pois estas substâncias tiveram comportamento diferenciado, provavelmente devido às condições analíticas no conjunto CG-EM.

A maioria das substâncias foram identificadas pela seqüência de eluição em conjunto com a interpretação dos fragmentos gerados. As regras de fragmentação

para os isoparafínicos são quase as mesmas para os parafínicos. Algumas pequenas diferenças foram suficientes para ajudar na identificação. Observando-se a figura 80, que é o espectrograma de um composto desconhecido (e a tabela 9 indica a interpretação), nota-se que existe uma seqüência de fragmentação parecida com a dos parafínicos (14 u.m.). Porém, a seqüência de “suave diminuição” das abundâncias relativas é interrompida no fragmento m/z 71, indicando que existe uma ramificação neste ponto.

Não se consegue inferir onde está a ramificação ou qual é a quantidade de ramificações presentes. Isto é uma limitação da técnica. Por exemplo, o fragmento $m/z=71$ ($C_5H_{11}^+$) pode representar diversos isômeros:

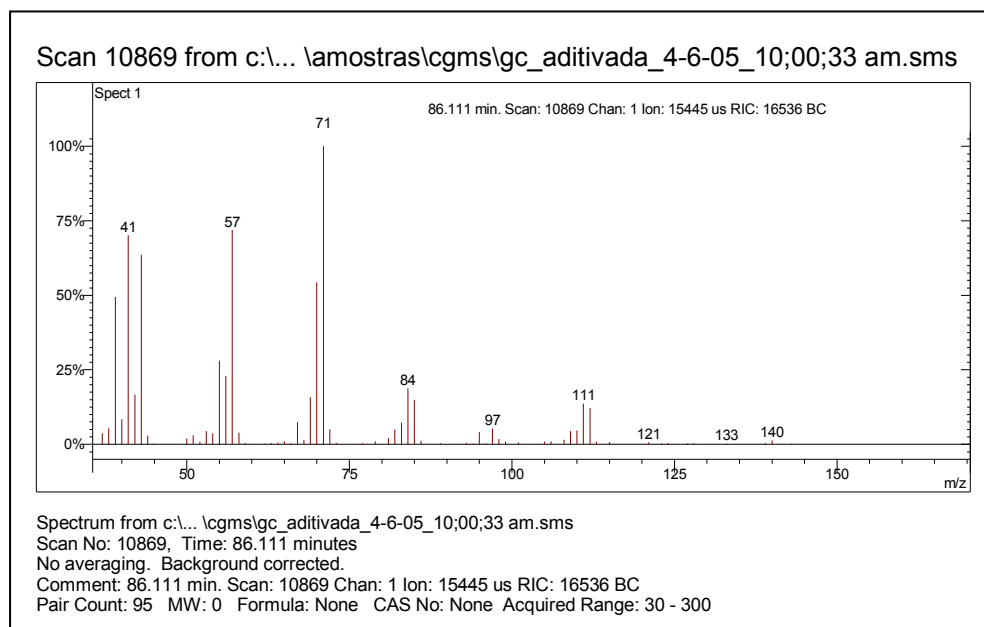
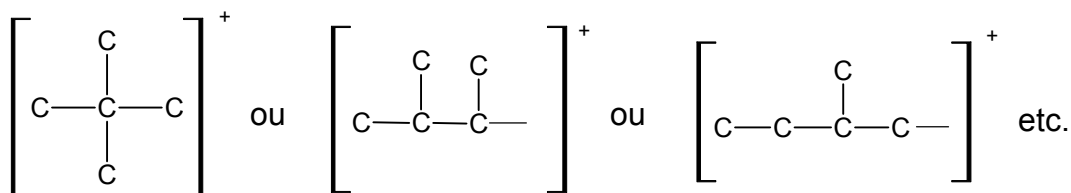


FIGURA 80 – ESPECTROGRAMA DE UM COMPOSTO DESCONHECIDO IDENTIFICADO COMO ISOPARAFÍNICO COM 10 CARBONOS

TABELA 09 - INTERPRETAÇÃO DE FRAGMENTOS DE UM COMPOSTO DESCONHECIDO

Íon m/z	Fragmento	Observação
140	$[M]^{+} = C_{10}H_{20}^{+}$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
111	$C_8H_{15}^{+}$	Perda de etila.
97	$C_7H_{13}^{+}$	Perda de propila.
84	$C_6H_{12}^{+}$	Fragmentação alílica.
71	$C_5H_{11}^{+}$	Fragmentação alílica.
57	$C_4H_9^{+}$	Fragmentação alílica.

Conclusão: a substância é um isoparafínico com 10 carbonos.

Sabe-se que a clivagem (fragmentação) ocorre preferencialmente nas ramificações porque o carbocátion gerado é estável. Por exemplo, a figura 81 mostra o esquema de fragmentação do composto 2,2-dimetileptano, no qual está indicada a clivagem nos locais mais prováveis. A formação de outros fragmentos também é possível, mas a probabilidade de ocorrência é menor, traduzida em baixa abundância relativa. Nota-se que o íon molecular está ausente, pois é muito mais provável que ocorram as fragmentações da molécula, do que retirar-se somente um elétron de sua nuvem eletrônica. O nível de energia é alto, justamente para que estas clivagens ocorram, de modo a fornecer informações estruturais. A figura 82 mostra o espectrograma do composto estudado e a tabela 10 mostra a interpretação de seus fragmentos.

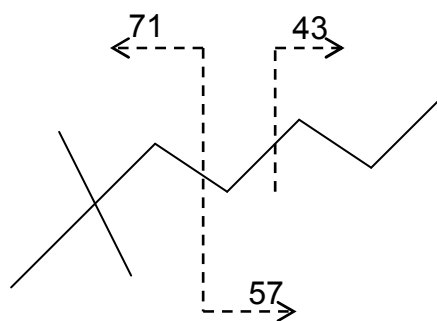


FIGURA 81 – ESQUEMA DE FRAGMENTAÇÃO PELO IMPACTO DE ELÉTRONS DA MOLÉCULA DO 2,2-DIMETILEPTANO

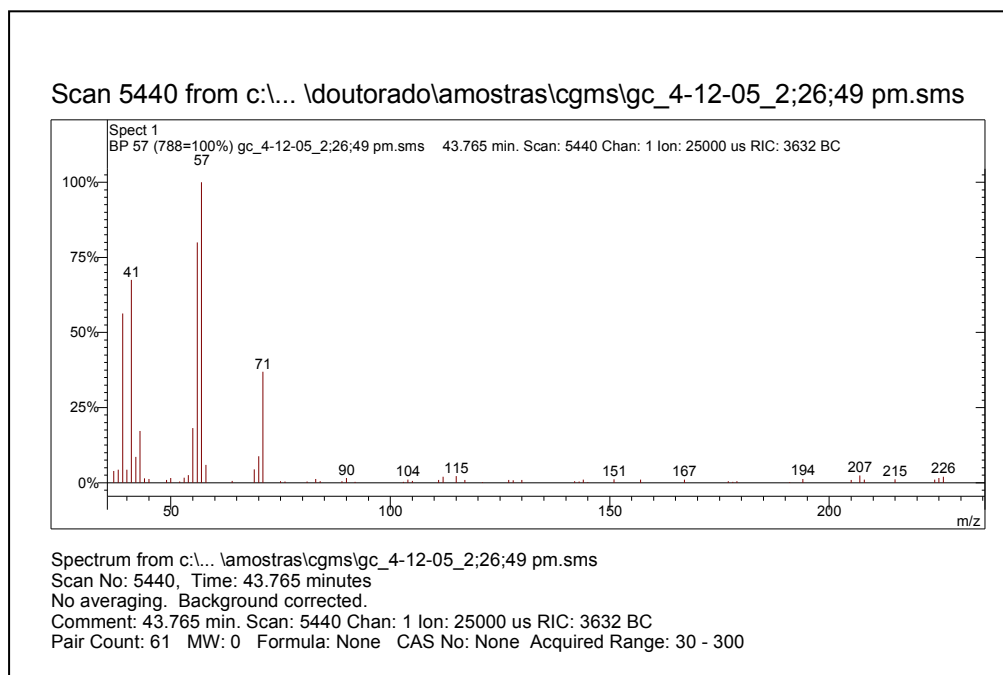


FIGURA 82 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO 2,2-DIMETILEPTANO

TABELA 10 - INTERPRETAÇÃO DOS FRAGMENTOS DO COMPOSTO 2,2-DIMETILEPTANO

Íon m/z	Fragmento	Observação
128 (ausente)	$[M]^{+} = C_9H_{20}^{+}$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
71	$C_5H_7^{+}$	Perda de butano com rearranjo de hidrogênio.
57	$C_4H_9^{+}$	Perda de pentila.
43	$C_3H_7^{+}$	Fragmentação alílica.

6.2.2.3 Grupo químico 3: naftênicos

Os espectros de massa de compostos naftênicos (alcanos cíclicos) apresentaram, no geral, a presença do íon molecular, como resultado da estabilidade obtida no anel. Porém, compostos com muitos substituintes não apresentaram o íon molecular em seus espectros, pois a estabilidade do anel não é suficiente para ser transferida a tantos substituintes. Um exemplo disso está apresentado na figura 83, cujo composto 1,1,3-trimetilcicloexano deveria apresentar o íon molecular $m/z = 126$, mas apresenta o íon $[M-1]^+ = 125$, que corresponde à perda de um hidrogênio. Mesmo não apresentando o íon molecular, também é possível descobrir a massa molecular do composto através das regras de fragmentação (tabela 11).

As fragmentações mais características são a clivagem do anel com perda de C_2H_4 (28) ou C_2H_5 (29) e perda das ramificações. No caso do composto 1,1,3-trimetilcicloexano não se observa a clivagem do anel pelas perdas de 28 e 29 u.m., mas observa-se através do fragmento m/z 83 que corresponde à perda das ramificações acompanhadas de rearranjos de hidrogênio, comum em compostos naftênicos com anel de 6 carbonos.

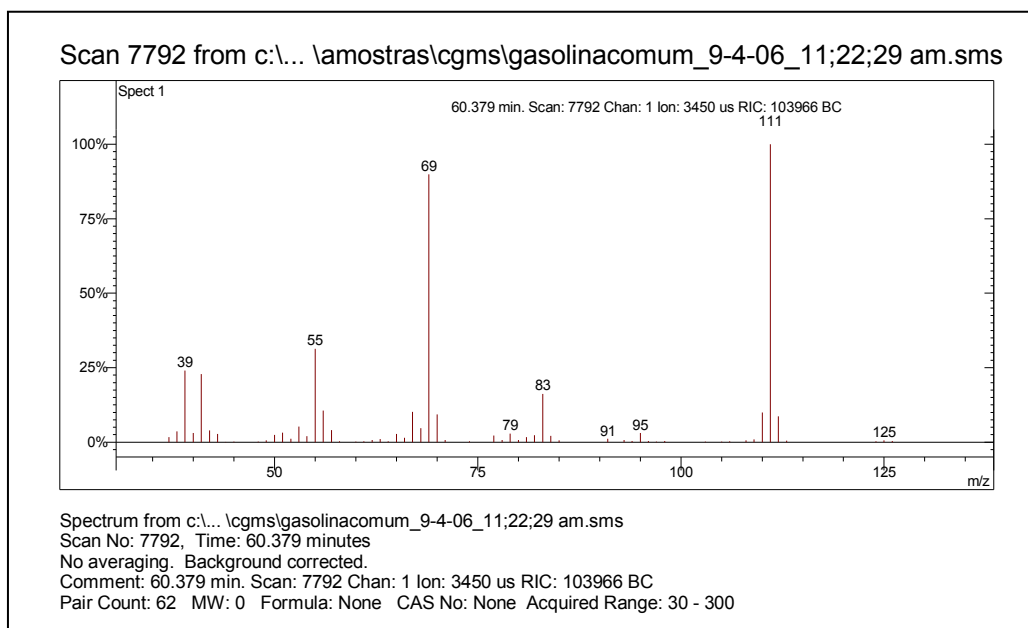


FIGURA 83 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO 1,1,3-TRIMETILCICLOEXANO

TABELA 11 - INTERPRETAÇÃO DOS FRAGMENTOS DO COMPOSTO 1,1,3-TRIMETIL-CICLOEXANO

Íon m/z	Fragmento	Observação
126 (ausente)	$[M]^{+*} = C_9H_{18}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
111	$[M - 15]^+ = C_8H_{15}^+$	Perda de metila. Pico base.
83	$[M - 43]^+ = C_7H_{11}^+$	Perda de propila.
69	$C_5H_9^+$	Perda de butila.
55	$C_4H_7^+$	Perda de pentila.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação do anel.

Observa-se as mesmas fragmentações características para o composto cicloexano (PM = 84), porém a presença do íon molecular está acentuada devido à estabilidade do anel, apresentando alta abundância relativa (figura 84). A interpretação dos fragmentos está apresentada na tabela 12. Verifica-se a presença de dois íons pares e dois ímpares, e uma outra regra de fragmentação nos diz que, quando o íon molecular é par, por simples fragmentação é produzido somente íons ímpares e vice-versa. A presença de outro íon par significa que houve fragmentação com rearranjos de hidrogênio. Estes rearranjos de hidrogênio não são exclusivos dos naftênicos e podem ocorrer em aromáticos e olefínicos também.

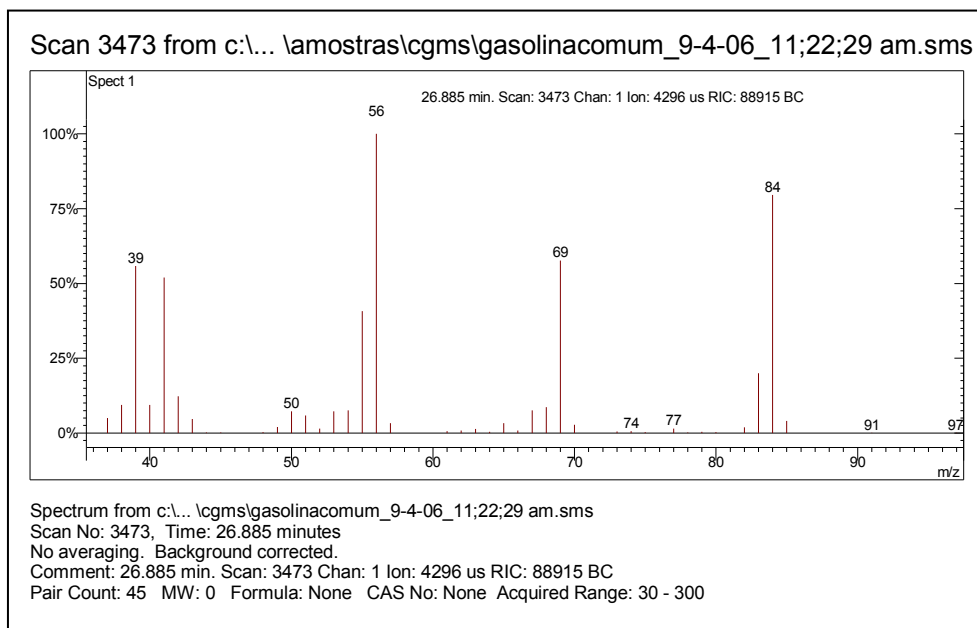


FIGURA 84 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO CICLOEXANO

TABELA 12 - INTERPRETAÇÃO DOS FRAGMENTOS DO COMPOSTO CICLOEXANO

Íon m/z	Fragmento	Observação
84	$[M]^{++} = C_6H_{12}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
69	$[M - 15]^+ = C_5H_9^+$	Fragmentação do anel com perda de metila.
56	$[M - 28]^+ = C_5H_9^+$	Fragmentação do anel com perda de eteno.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação do anel com perda de propila.

Após montar o apêndice D, verificou-se que as mesmas regras de fragmentação dos naftênicos também se aplicavam aos olefínicos. A presença de um anel saturado pode ser confundido com a presença de uma insaturação. Observando-se as figuras 85 e 86, não é possível identificar quem é o olefínico e quem é o naftênico, pelas regras de fragmentação.

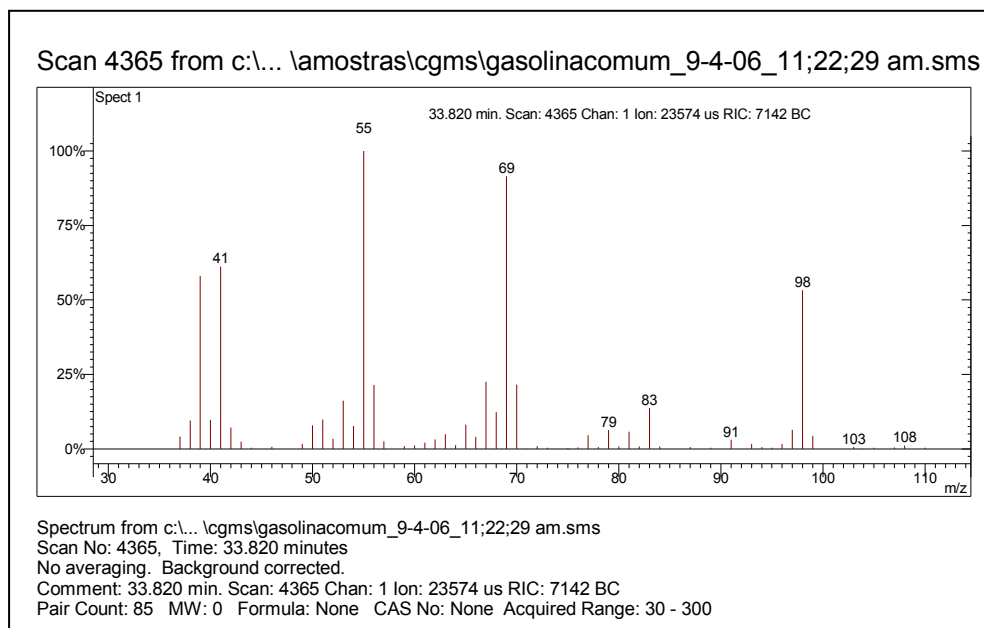


FIGURA 85 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO 1,1DIETILCICLOPROPANO

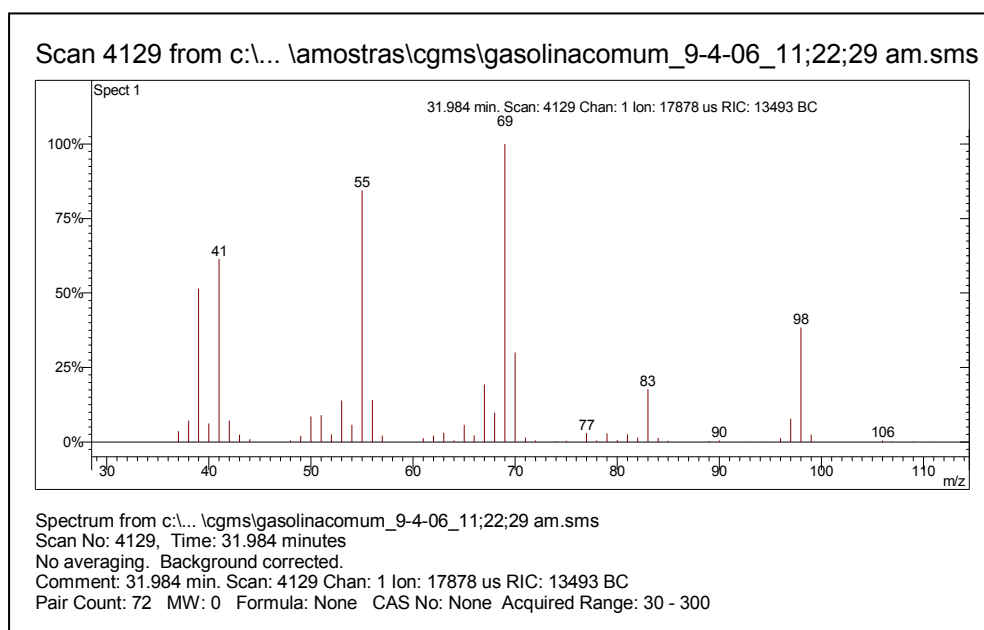


FIGURA 86 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO 3-METILEX-2-ENO

A ferramenta a ser aplicada, neste caso, é a ionização química, pois o olefínico geraria um íon $[M+1]^+$, enquanto o naftênico apresentaria um íon $[M-1]^+$, ou instabilidade no espectro de ionização química.

6.2.2.4 Grupo químico 4: olefínicos

Assim como os naftênicos, os compostos olefínicos foram os mais difíceis de serem identificados por espectrometria de massas. As duplas ligações não podem ser localizadas na molécula, devido à ressonância da nuvem eletrônica. As figuras 87 e 88 mostram o espectro de massas por impacto de elétrons de dois compostos olefínicos, com o mesmo número de carbonos, porém com a dupla ligação localizada em diferentes locais.

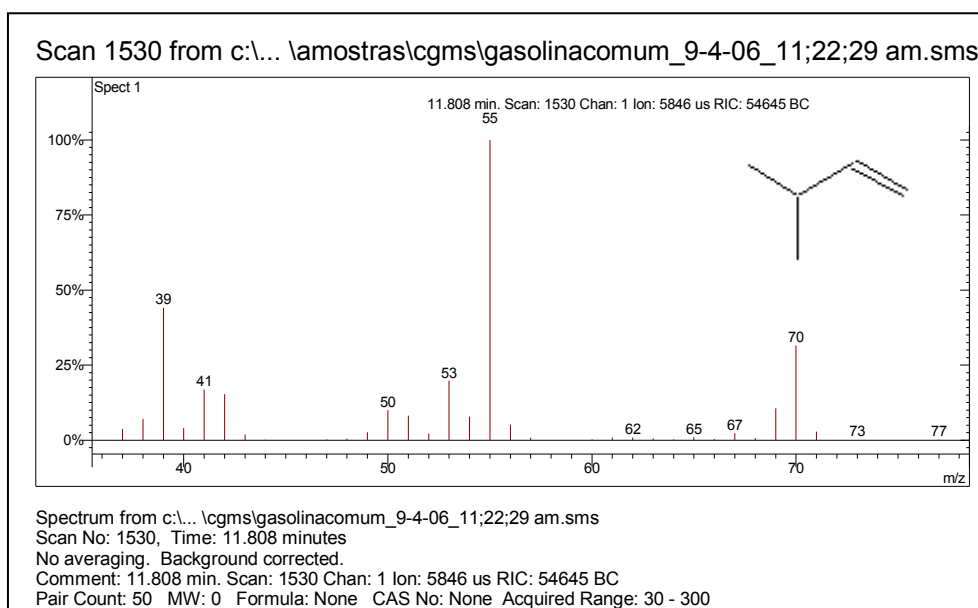


FIGURA 87 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO 3-METIL-BUT-1-ENO

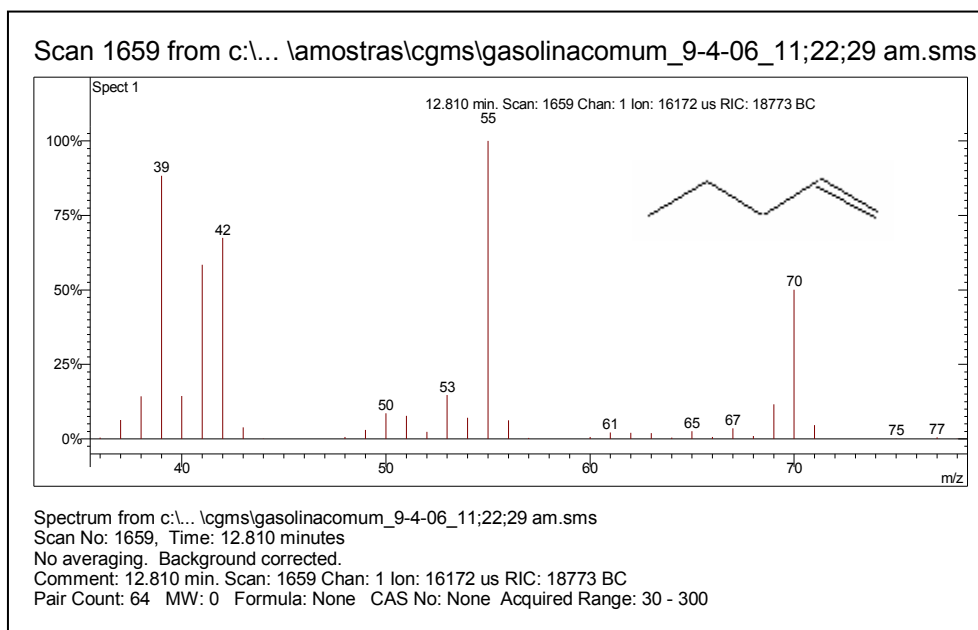


FIGURA 88 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO 1-PENT-1-ENO

A presença do íon molecular é mais freqüente, devido à estabilização da molécula pela dupla ligação. Quanto maior o número de insaturações, mais abundante será o íon molecular. Como exemplo o composto (Z)-penta-1,3-dieno, que é um dieno conjugado, apresenta o íon molecular $m/z = 68$ abundante (acima de 25%) no espectrograma (figura 89).

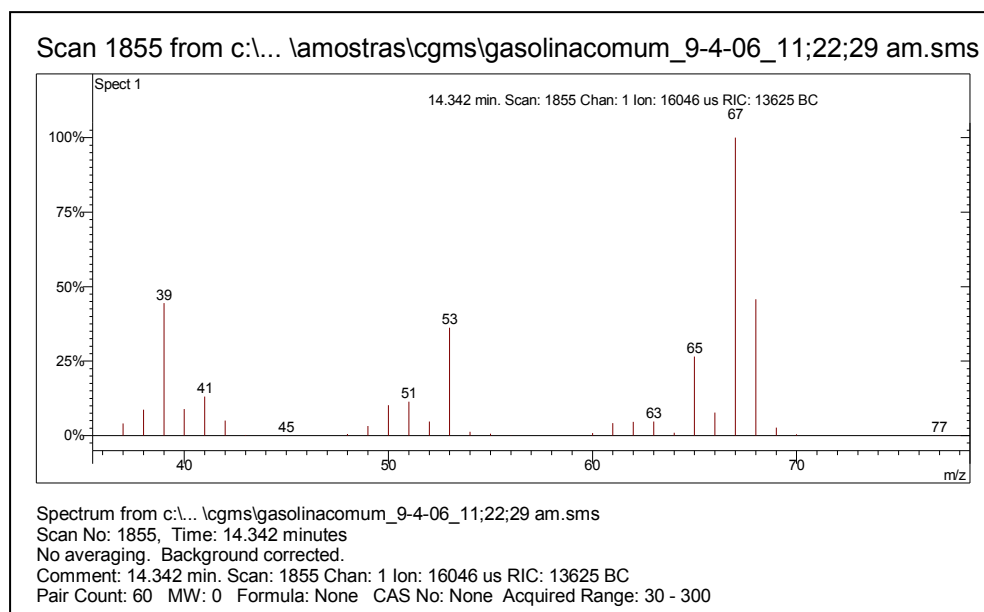


FIGURA 89 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO (Z)-PENTA-1,3-DIENO

Novamente, quanto mais ramificações o olefínico tiver, ou se a molécula for longa e a dupla ligação estiver localizada em uma das extremidades, a abundância do íon molecular tende a diminuir ou até desaparecer. A fragmentação mais característica é a perda de ramificações, geralmente acompanhada de rearranjos de hidrogênio. Ocorre preferencialmente a clivagem na ligação β à dupla ligação (segunda ligação após a dupla). Observando-se o esquema de fragmentação da molécula do 2-metilpent-2-eno (figura 90), as clivagens mais comuns ocorrem na ligação beta, gerando íons de $m/z = 69$ e 15 (tabela 13). Como a varredura de massa foi ajustada para massas maiores que 20, o íon $m/z = 15$ não aparece no espectrograma (figura 91).

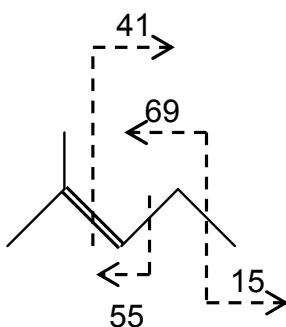


FIGURA 90 – ESQUEMA DE FRAGMENTAÇÃO PELO IMPACTO DE ELÉTRONS DA MOLÉCULA DO 2-METILPENT-2-ENO

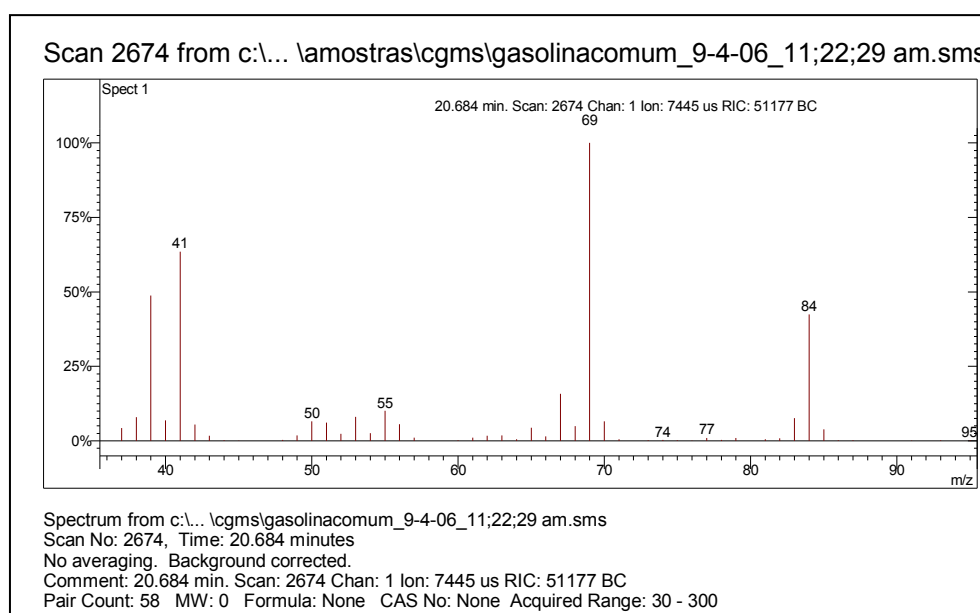


FIGURA 91 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO 2-METILPENT-2-ENO

TABELA 13 - INTERPRETAÇÃO DOS FRAGMENTOS DO COMPOSTO 2-METILPENT-2-ENO

Íon m/z	Fragmento	Observação
84	$[M]^{+} = C_6H_{12}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
69	$[M - 15]^{+} = C_5H_9^{+}$	Perda de metila. Pico base.
55	$[M - 29]^{+} = C_4H_7^{+}$	Fragmentação alílica. Perda de C_2H_5 .
41	$C_3H_5^{+}$	Perda de propila.

Resumindo, os olefínicos podem ser identificados desde que se conheça a função química com antecedência. Neste caso sabe-se que é um olefínico por comparação com os outros bancos de dados, através da seqüência de eluição; caso contrário, pode ser facilmente confundido com um naftênico de mesmo número de carbonos. A ionização química foi bastante importante, pois permitiu diferenciar os olefínicos dos naftênicos pela formação do fragmento $[M+1]^+$.

6.2.2.5 Grupo químico 5: aromáticos

Os aromáticos, devido à presença do anel característico, apresenta íon molecular estável e, a ressonância do anel aromático é capaz de estabilizar os substituintes, mesmo que de cadeia longa (figura 92). Quanto maior o número de anéis aromáticos, mais estável e abundante é o íon molecular. A figura 93 mostra que a quantidade de fragmentos gerados pelo impacto de elétrons do composto 2-metilnaftaleno é pequena. Isto quer dizer que aromáticos condensados são extremamente difíceis de fragmentar, devido à ressonância dos anéis aromáticos. O que se consegue é retirar um hidrogênio. Mesmo que ocorra a fragmentação de um dos anéis, ocorrem rearranjos de hidrogênio para fechar um novo anel.

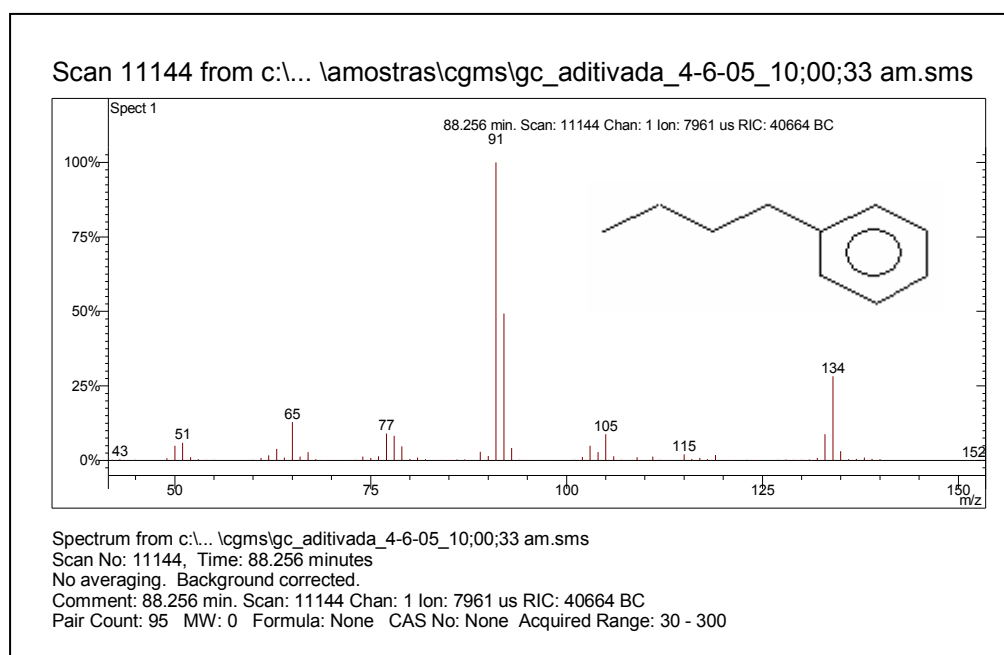


FIGURA 92 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO BUTILBENZENO

Um fragmento $m/z = 115$, como interpretado na tabela 14, mostra que houve perda da ramificação e apenas um carbono. Isto só é possível porque, no fragmento que fica com a carga positiva, ocorreram rearranjos de hidrogênio para estabilizá-lo. Um modo de estabilizar é fechar o anel.

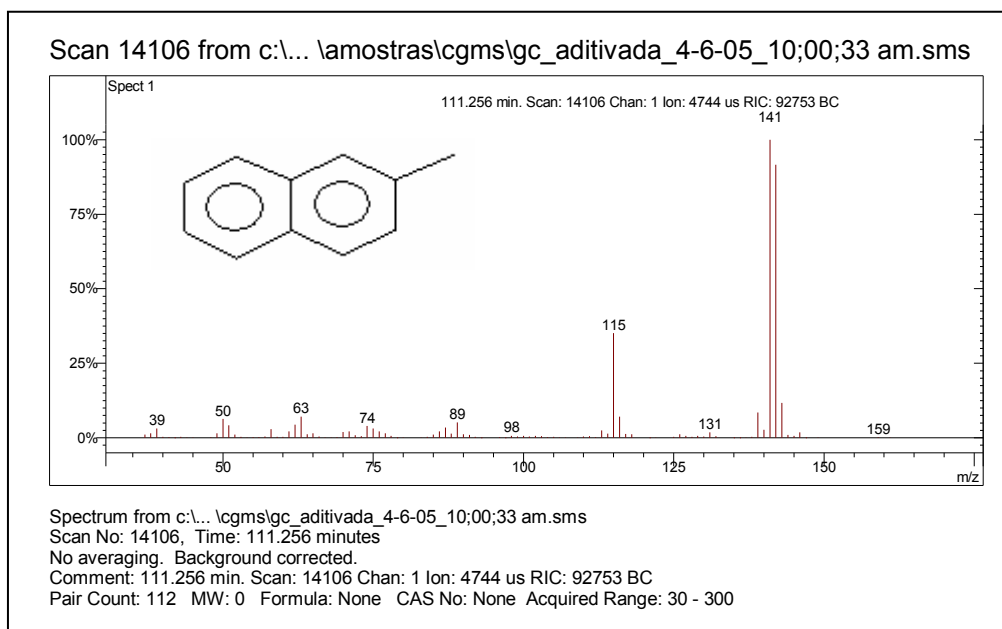
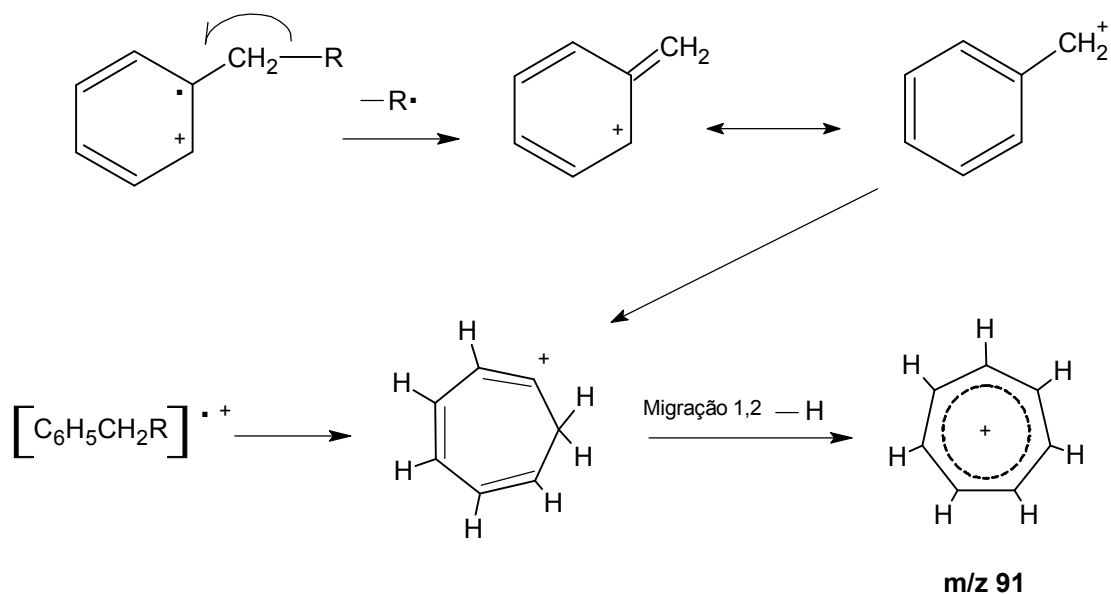


FIGURA 93 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO 2-METILNAFTALENO

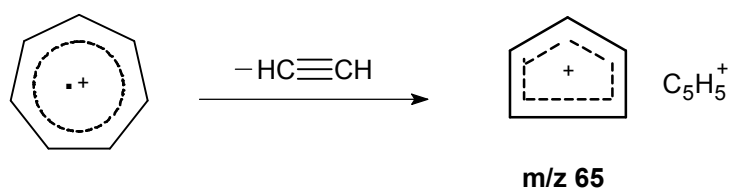
TABELA 14 - INTERPRETAÇÃO DOS FRAGMENTOS DO COMPOSTO 2-METILNAFTALENO

Íon m/z	Fragmento	Observação
142	$[M]^{+} = C_{11}H_{10}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica..
141	$[M-1]^{+} = C_{11}H_9^{+}$	Perda de hidrogênio.
115	$C_9H_7^{+}$	Perda de C_2H_3 com rearranjo de hidrogênio.

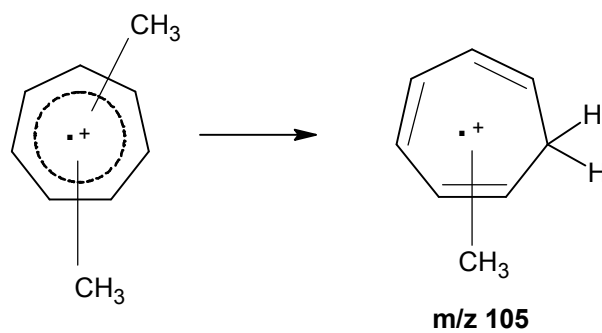
Aliás, o anel benzênico é excelente para estabilizar pequenos substituintes e formar fragmentos difíceis de se imaginar. Por exemplo, um fragmento bastante característico de aromáticos mono-substituídos é o íon tropílio $m/z = 91$ ($C_7H_7^{+}$), formado ao incorporar em sua nuvem eletrônica um CH, através da quebra da ligação β do anel:



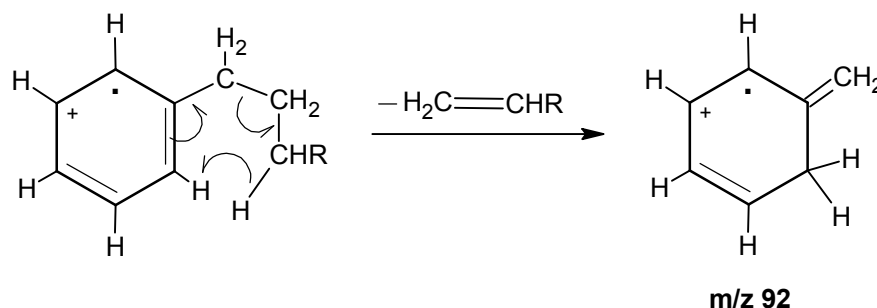
O íon tropílio é estável, mas também pode fragmentar-se dentro do *ion trap*, perdendo uma molécula neutra de acetileno e formando o íon $m/z = 65$ (C_5H_5^+):



O anel benzênico também é capaz de estabilizar dois carbonos, formando o íon tropílio substituído $m/z = 105$ ($\text{C}_8\text{H}_{10}^+$). Isto ocorre em aromáticos substituídos com mais de dois carbonos:



Porém, quando o substituinte é longo (acima de dois carbonos), ocorrem rearranjos de hidrogênio, eliminando-se uma molécula de alceno e formando outro íon especial de massa $m/z = 92$ ($C_7H_8^+$):



Para exemplificar a maioria destes fragmentos escolheu-se o espectro do composto 3-metilbutilbenzeno (figura 94) e a interpretação de seus fragmentos está na tabela 15.

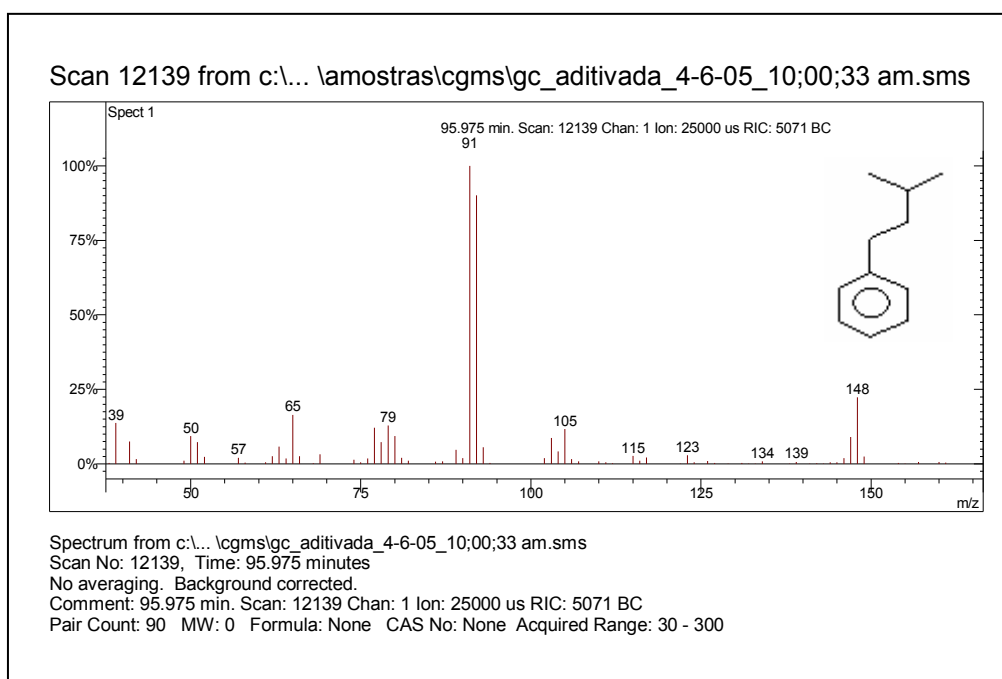
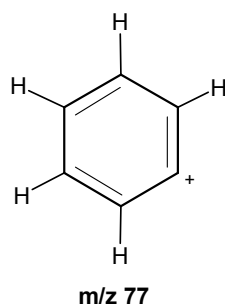


FIGURA 94 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO 3-METILBUTILBENZENO

TABELA 15 - INTERPRETAÇÃO DOS FRAGMENTOS DO COMPOSTO
3-METILBUTILBENZENO

Íon m/z	Fragmento	Observação
148	$[M]^{+} = C_{11}H_{16}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
92	$C_7H_8^{+}$	Rearranjo de hidrogênio. Para que este rearranjo ocorra, a substituição alquílica deve ser longa e o aromático deve ser mono substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.

Outro fragmento característico dos aromáticos é o íon benzílico ($C_6H_5^{+}$), formado a partir da perda de uma ramificação e com rearranjo de hidrogênio:



Devido à exclusividade dos fragmentos característicos, os aromáticos foram os compostos com maior facilidade de identificação. A maior dificuldade foi identificar desconhecidos cujo espectros não estavam puros, pois observou-se que no final da corrida cromatográfica, muitos compostos co-eluíam e o espectro formado era de duas substâncias juntas (figura 95).

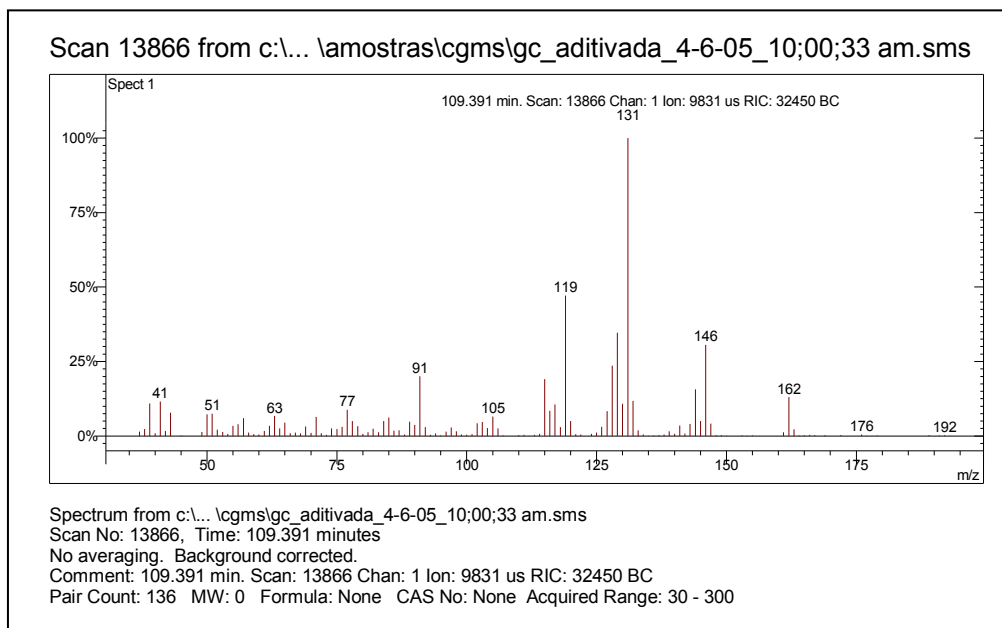


FIGURA 95 – ESPECTROGRAMA DE UM COMPOSTO AROMÁTICO DESCONHECIDO

TABELA 16 - INTERPRETAÇÃO DOS FRAGMENTOS DE UM AROMÁTICO DESCONHECIDO

Íon m/z	Fragmento	Observação
162	$[M]^{++} = C_{12}H_{18}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
146	$C_{11}H_{14}^+$	Contaminação de outro aromático.
131	$C_{10}H_{11}^+$	Contaminação de outro aromático.
119	$C_9H_{11}^+$	Perda de C_3 .
105	$C_8H_{10}^+$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.

Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 12 carbonos. Coelui com outro aromático.

Só se consegue identificar duas substâncias juntas quando se calcula as fragmentações prováveis a partir de um íon molecular. Quando os cálculos não fecham, deve-se observar o aspecto do espectro e verificar se existem mais picos do que o esperado. A tabela 16 mostra a interpretação de um espectro de um composto desconhecido, o qual apresenta alguns íons característicos de aromáticos, porém ao calcular as perdas de ramificações notou-se que haviam duas substâncias coeluído.

Por exemplo, assume-se que o íon molecular é o íon $m/z = 162$ e diminui-se o valor da massa do próximo fragmento $m/z = 146$. A diferença entre eles é de 16 u.m. Pode ser perda de um grupo metila CH_3 (15 u.m) e um hidrogênio. Mas o próximo fragmento a perda é de 31 u.m., que não é muito provável (perda de metila e metano ao mesmo tempo). Mas se existe outro íon molecular $m/z = 146$, a perda provável do próximo fragmento não explicado seria de uma metila ($146 - 131=15$), justificando-se portanto a presença de dois íons moleculares. Além disso, a ionização química confirmou a existência de dois íons de massa $m/z = 163$ e 147 , que equivalem ao fragmento $[\text{M}+1]^+$ de cada íon molecular (figura 96).

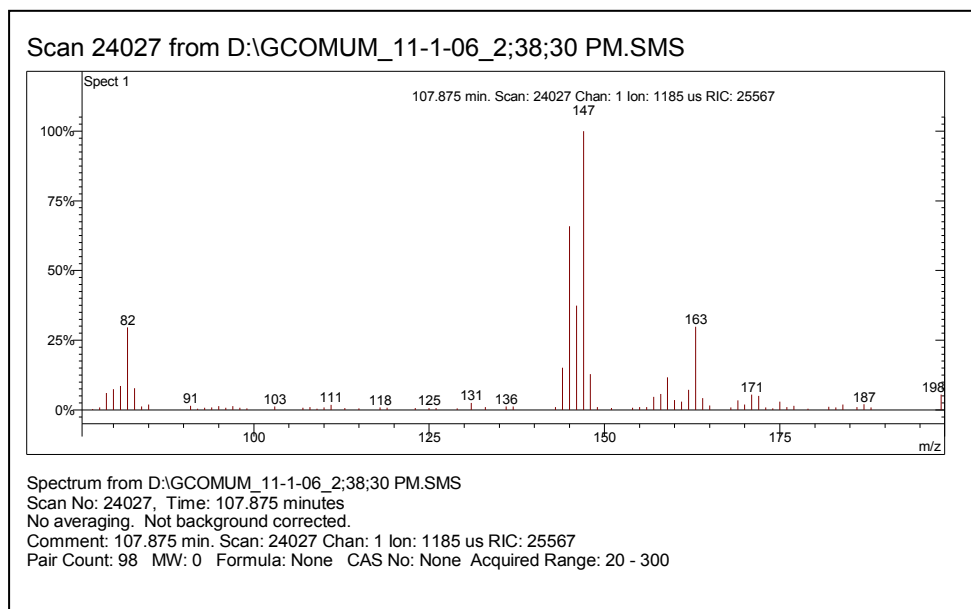


FIGURA 96 – IONIZAÇÃO QUÍMICA COM ACETONITRILA DE UM COMPOSTO AROMÁTICO SUSPEITO DE COELUIR COM OUTRO

Pela limitação inerente da técnica não se pode afirmar onde estão localizadas as ramificações e quais os tipos das mesmas em compostos desconhecidos, porém para um aromático conhecido previamente, a identificação torna-se simples. A figura

97 e a tabela 17 exemplificam o espectro e a interpretação de um aromático presente na gasolina.

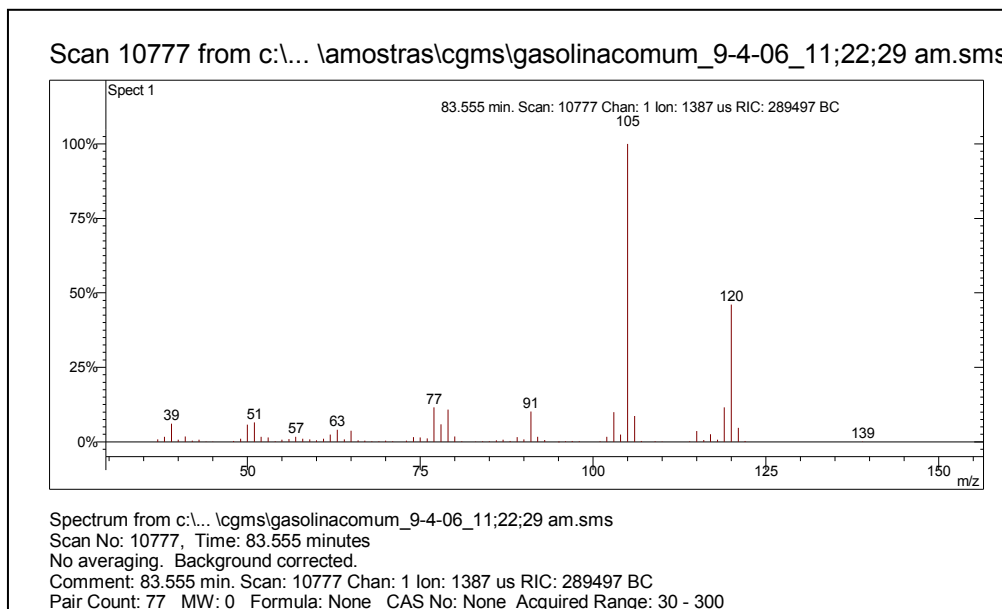


FIGURA 97 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO 1,3,5-TRIMETILBENZENO

TABELA 17 - INTERPRETAÇÃO DOS FRAGMENTOS DO 1,3,5-TRIMETILBENZENO

Íon m/z	Fragmento	Observação
120	$[M]^+ = C_9H_{12}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
105	$C_8H_{10}^+$	Perda de metila. Formação de íon tropílio substituído, caracterizando aromático alquil substituído .
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.

6.2.2.6 Grupo químico 6: álcoois

O etanol (PM=46) é o único representante desta classe presente na gasolina e, sendo assim, pretende-se apenas descrever os fragmentos obtidos neste estudo, sem estabelecer regras de fragmentação para o grupo químico.

Sabe-se que, para álcoois de cadeia longa, o íon molecular quase não aparece. Neste caso, como o etanol é um álcool com apenas dois carbonos, o mesmo apresenta um íon molecular estável $m/z = 46$ (figura 98), pois o grupo OH estabiliza a molécula. A presença do íon $[M-1]^+ = 45$ é marcante e representa a perda de um hidrogênio. A fragmentação característica desta classe é a perda de uma molécula neutra de água, e para o etanol esta perda está representada no fragmento $m/z = 28$ ($46-18$) e, neste caso, não pode ser considerado como fragmento característico, já que a sua presença é muito pouco abundante. A tabela 18 explica quais são os principais fragmentos gerados por impacto de elétrons e a figura 97 mostra o esquema de fragmentação da molécula de etanol.

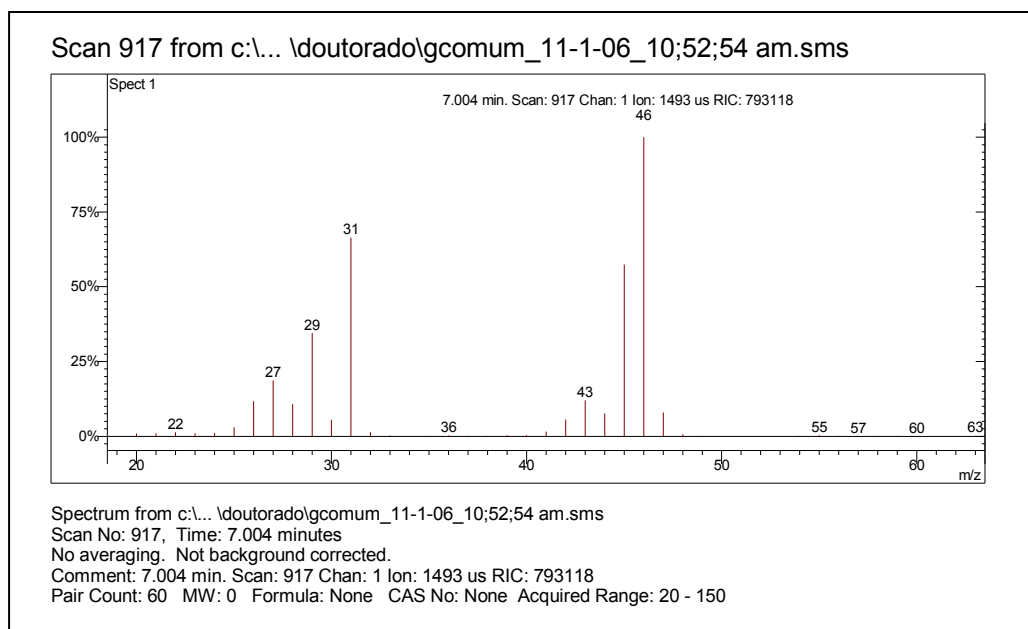


FIGURA 98 – ESPECTROGRAMA DO COMPOSTO ETANOL

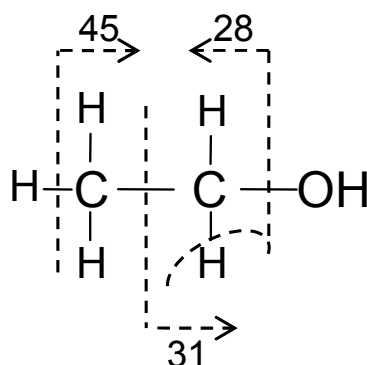


FIGURA 99 – ESQUEMA DE FRAGMENTAÇÃO PELO IMPACTO DE ELÉTRONS DA MOLÉCULA DO ETANOL

TABELA 18 - INTERPRETAÇÃO DOS FRAGMENTOS DO COMPOSTO ETANOL

Íon m/z	Fragmento	Observação
46	$[M]^+ = C_2H_6O^+$	Presença acentuada íon molecular.
45	$[M - 1]^+ = C_2H_5O^+$	Perda de hidrogênio.
31	$[M - 15]^+ = CH_3O^+$	Perda de metila. Fragmento característico indicando composto com oxigênio.
28	$[M - 18]^+ = CH_3O^+$	Desidratação. Perda de água (característico de álcoois).

Resumindo o que foi exposto até o momento, as classes dos aromáticos e parafínicos foram as mais fáceis de serem identificadas pela técnica de ionização por impacto de elétrons, porém, a identificação necessitou das técnicas auxiliares de ionização química e da seqüência de eluição de compostos já conhecidos para ser executada. A figura 100 mostra a seqüência de eluição de alguns compostos identificados ou confirmados por CG-EM e ionização química.

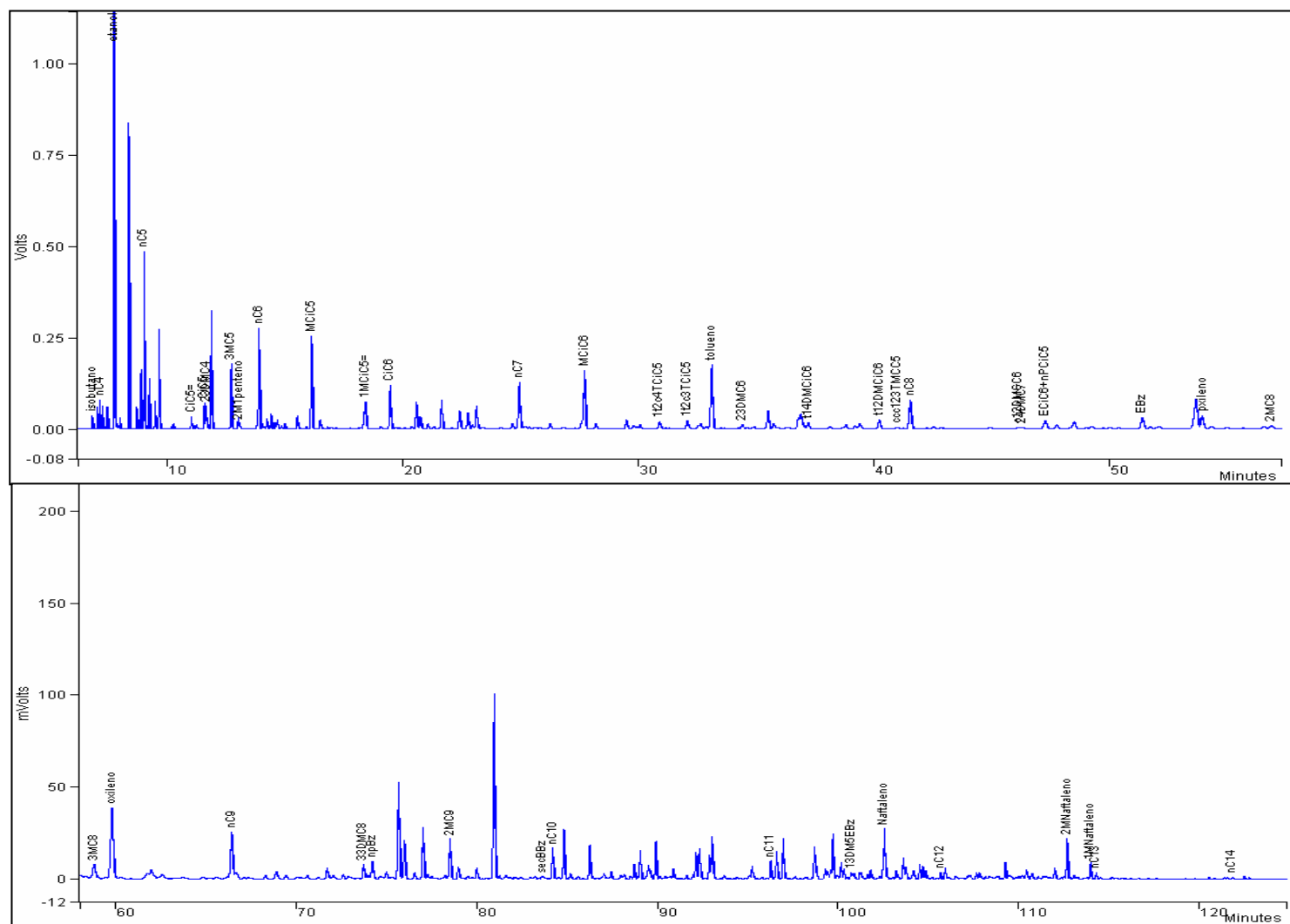


FIGURA 100 – CROMATOGRAMA DE GASOLINA COM IDENTIFICAÇÃO AUTOMÁTICA POR DHA CONFIRMADA POR ESPECTROMETRIA DE MASSAS E IONIZAÇÃO QUÍMICA

NOTA: Nomenclatura específica para apresentação do cromatograma. C6 - 6 carbonos; C7 - 7 carbonos; nC4 a nC14 - parafínicos butano a tetradecano; = insaturação ex: CiC5= (ciclopenteno); M - metil; E - etil; P - propil; DM - dimetil; Ci - ciclo; Bz - benzeno; t - trans; c - cis; o - orto; m - meta; p - para.

6.3 Modelagem Matemática

6.3.1 Pré-tratamento

A figura 101 mostra os espectros de IV das 128 amostras de gasolinas, adquiridos ao longo de dois anos e meio, entre os anos de 2005 a 2007, dentre as quais haviam 22 amostras de gasolina aditivada. Observa-se que ocorre uma variação na linha de base devido a mudanças ao longo do tempo no posicionamento e/ou desgaste da célula ATR. Imperfeições na ótica do instrumento também podem ocasionar estas variações (ESTIENNE *et al.*, 2004, p. 211). Esta grande variação de linha de base certamente é uma fonte de ruído que atrapalha a regressão de dados. Para corrigir este problema utilizou-se o autoescalamento na matriz **X** (figura 102).

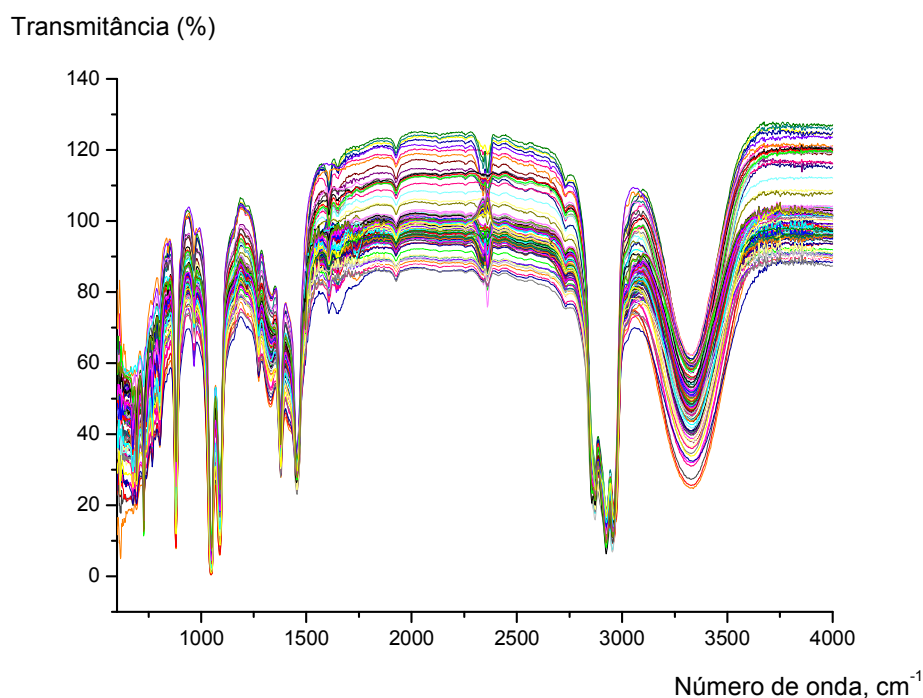


FIGURA 101 – ESPECTRO INFRAVERMELHO DE 128 AMOSTRAS DE GASOLINA.

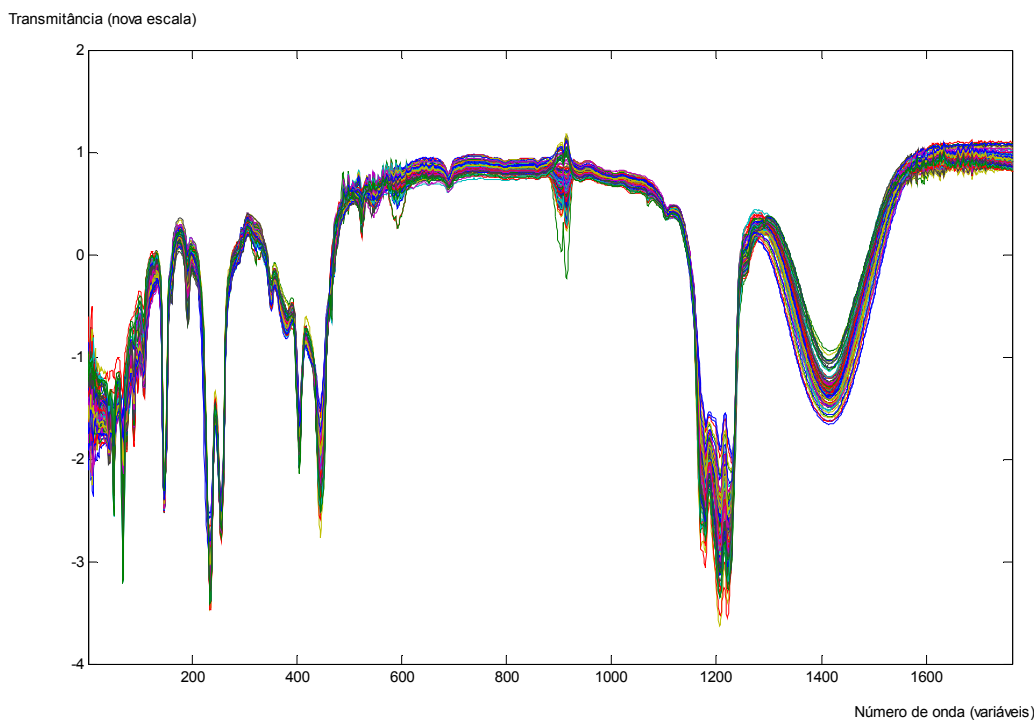


FIGURA 102 – ESPECTRO INFRAVERMELHO DE 128 AMOSTRAS DE GASOLINA APÓS AUTOESCALONAMENTO.

Observa-se na figura 99 que existem regiões do espectro IV, principalmente nas extremidades, que apresentam uma certa instabilidade de sinal. A região de 400 a 738 cm^{-1} apresenta instabilidade devido a interferências da célula de seleneto de zinco. Para melhorar a qualidade da matriz \mathbf{X} de entrada, esta região de interferência foi removida. Da mesma forma, a região de 3800 a 4000 cm^{-1} foi retirada, pois não havia informação analítica significativa e poderia atrapalhar a modelagem matemática inserindo ruído instrumental.

Um primeiro passo em qualquer análise de dados seria verificar dados suspeitos, faltantes ou inválidos utilizando-se o PCA, uma ferramenta muito útil para avaliação da matriz de espectros. Ela permite visualizar, através de gráficos de componentes principais, a abrangência ou dispersão dos dados. Ao apresentar uma matriz \mathbf{X} [128 amostras x 1588 transmitâncias], representando a composição química de cada amostra, o programa calcula a variância de cada uma e agrupa-as por similaridade. Com isto, pode-se afirmar que uma amostra possui composição química diferenciada das outras se a mesma estiver afastada das demais nos gráficos apresentados. A principal aplicação da análise PCA é verificar se existe grupamentos de amostras característicos, tais como grupos de gasolina aditivada,

diferenciados dos grupos de gasolina comum ou de grupos de gasolina de alta octanagem.

Principal Components Analysis Model			
X-block: ir 128 by 1588			
Preprocessing: Autoscale			
Num. PCs: 3			
Cross validation: venetian blinds w/ 10 splits			
RMSEC: 0.161026			
RMSECV: 6.6907			
Percent Variance Captured by PCA Model			
Principal Component Number	Eigenvalue of Cov(X)	% Variance Captured This PC	% Variance Captured Total
1	1.32e+003	82.92	82.92
2	1.89e+002	11.89	94.81
3	4.09e+001	2.58	97.39

FIGURA 103 – ANÁLISE PCA DAS 128 AMOSTRAS DE GASOLINA EXTRAÍDO PROGRAMA PLS TOOLBOX DO MATLAB™ 7.4.0 (R2007a)

A figura 103 mostra o resumo da análise PCA (*Principal Component Analysis*) para os espectros de IV. Observa-se que a variância total capturada é de 97,39% com 3 CPs. Isto significa que 97,39% da informação contida nos espectros foi utilizada para construir 3 PCs. Desta forma ocorreu a redução de 1588 variáveis para 3 novas variáveis representantes do sistema sob estudo.

Na figura 104 observa-se uma boa dispersão nas amostras do banco de dados, sendo bastante desejável esta heterogeneidade. Apenas um pequeno espaço amostral possui um aglomerado de amostras com o perfil químico semelhante. Talvez seja necessário retirar algumas amostras desta aglomeração para que o espaço amostral seja mais representativo para modelagem. Salienta-se que este grupo de 128 amostras foi dividido em dois grupos (treinamento e validação) igualmente heterogêneos, para posterior modelagem com PLS.

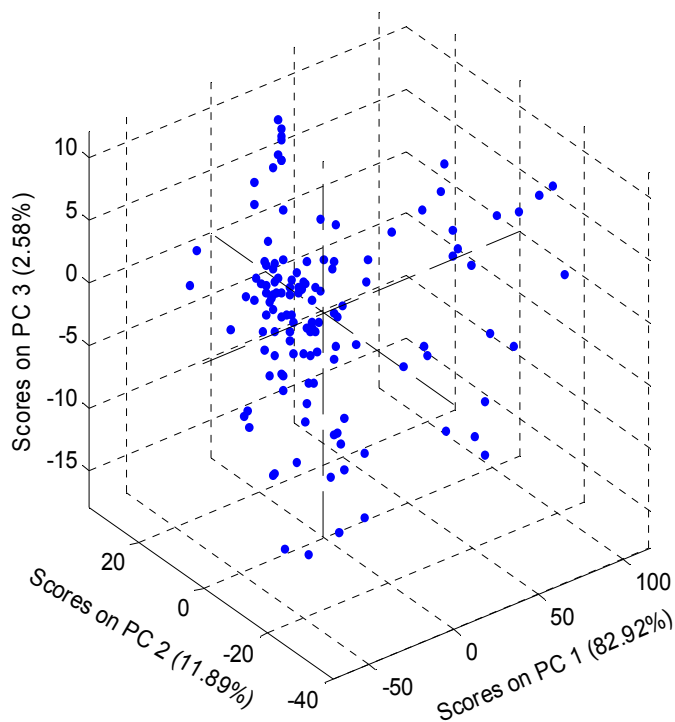


FIGURA 104 – GRÁFICO DOS COMPONENTES PRINCIPAIS OBTIDOS A PARTIR DE ANÁLISE PCA DA MATRIZ DE ESPECTROS DE IV DE 128 AMOSTRAS DE GASOLINA, EXTRAÍDO DO PROGRAMA PLS TOOLBOX DO MATLAB™ 7.4.0 (R2007a)

As amostras estão sem identificação no gráfico para torná-lo legível, mas pode-se afirmar que não há predominância ou separação de grupos como gasolina comum ou aditivada. Ocorreu grande variabilidade na composição química no banco de dados, impedindo a visualização de grupos especiais.

Para melhor visualização da dispersão dos dados, as figuras 105 e 106 mostram os mesmos dados da figura 104, porém em duas dimensões.

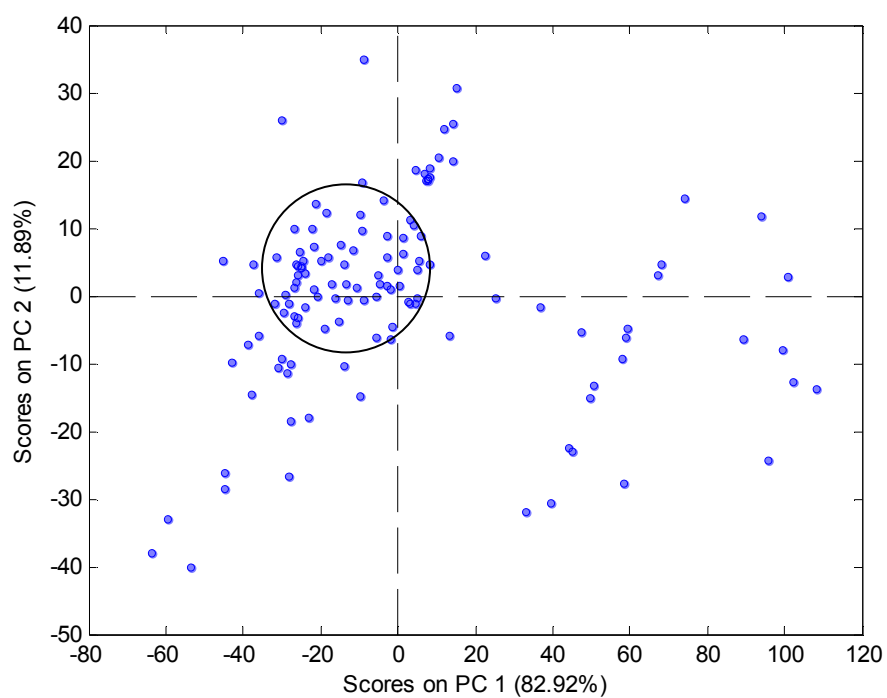


FIGURA 105 – GRÁFICO DE DUAS COMPONENTES PRINCIPAIS (PC1/PC2) DE 128 AMOSTRAS DE GASOLINA EXTRAÍDO DO PROGRAMA PLS *TOOLBOX* DO MATLAB™ 7.4.0 (R2007a)

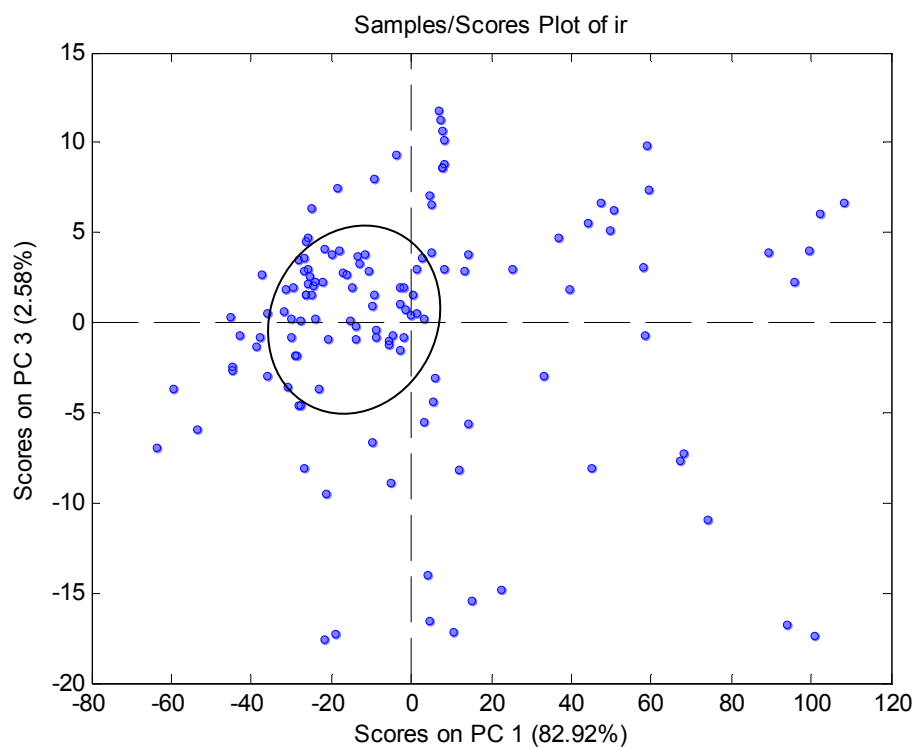


FIGURA 106 – GRÁFICO DE DUAS COMPONENTES PRINCIPAIS (PC1/PC3) DE 128 AMOSTRAS DE GASOLINA EXTRAÍDO DO PROGRAMA PLS *TOOLBOX* DO MATLAB™ 7.4.0 (R2007a)

Após verificação de variabilidade dos dados e corte de regiões do espectro IV não úteis para modelagem, iniciou-se o estudo de pré-tratamento de dados direcionado para modelagem. Para as 50 primeiras amostras coletadas, o pré-tratamento utilizado nos espectros foi somente o autoescalamento, pois o ajuste dos dados era obtido facilmente. Com o passar dos meses, cada lote obtido começou a diferir do banco de dados inicial, com variações bruscas na linha de base, dificultando o ajuste. Deste modo, necessitou-se melhorar os sistemas matemáticos para pré-tratamentos, pois somente um autoescalamento era insuficiente para ajuste dos novos dados.

Alterou-se o número de varreduras ou *scans* de 32 para 16 pois acreditou-se que estava ocorrendo evaporação das amostras na célula conforme a estação do ano. Uma varredura de 16 *scans* é mais rápida que 32, e desta forma, tentou-se minimizar um erro analítico por outro de menor impacto. A varredura com 16 *scans* teoricamente apresenta maior ruído instrumental que 32 *scans*. Esta alteração mudou o pré-tratamento dos espectros. Para que o ajuste ocorresse, aplicou-se um pré-tratamento amplamente utilizado com espectros. Este pré-tratamento consiste em aplicar uma derivada de modo a melhorar a resolução do espectro de IV. Foi necessário aplicar a segunda derivada para que os resultados fossem satisfatórios. Com a aplicação de derivada, a resolução melhora, porém o ruído também é aumentado. Com isto associa-se a este pré-tratamento uma técnica chamada de “alisamento” para que se minimize a relação sinal/ruído.

No final do período de dois anos e meio de coleta de amostras, observou-se que os últimos lotes não se ajustavam facilmente, mesmo com todos os passos anteriormente citados e aqui resumidos: autoescalamento, segunda derivada e “alisamento”. Observou-se que outra fonte possível de ruído seria a alteração da superfície da célula ATR, com muitos riscos imperceptíveis a olho nu, porém bastante evidenciados quando colocados contra a luz. Como a célula ATR para amostra líquida era compartilhada com outros colegas de pós-graduação do Departamento de Química da UFPR, esta fonte de ruído instrumental passou a ser incorporada ao banco de dados. Novamente, a única maneira de manipular todo o banco de dados era adicionar mais outro passo no pré-tratamento. Dentre as opções do programa, a ortogonalização passou a fazer parte do grupo de pré-tratamentos, já que a mesma remove desvios sistemáticos não desejados dos espectros.

Decidiu-se parar a coleta das amostras neste ponto, pois o equipamento de infravermelho ficou indisponível por alguns meses, devido a reformas da sala que o continha. Mesmo com todos os problemas apresentados, com erros sistemáticos e aleatórios inserindo ruído no banco de dados, os pré-tratamentos utilizados conseguiram removê-los matematicamente, permitindo uma modelagem de boa qualidade. Vale a pena ressaltar que o ruído inserido na modelagem não é proveniente apenas dos espectros IV, mas também de todos os outros equipamentos que fornecem os dados da matriz **Y**. O monitoramento dos ruídos de cada equipamento é realizado através de testes de repetitividade e reprodutibilidade, durante todo o ano. Uma média anual de reprodutibilidade para cada equipamento está apresentada na tabela 19 e mostra o desvio experimental de cada propriedade a ser modelada.

TABELA 19 - DESVIOS EXPERIMENTAIS DE EQUIPAMENTOS UTILIZADOS NO ESTUDO

Propriedade	Equipamento	Variação (%) 2005	Variação (%) 2006	Variação (%) 2007
Massa específica	Densímetro DMA 4500	0,04	0,04	0,05
PV Reid	Minivap VPS	0,30	0,33	0,14
T ₁₀	Destiladores Herzog HDA 628/627	1,37	1,05	1,08
T ₅₀	Destiladores Herzog HDA 628/627	0,40	0,36	0,42
T ₉₀	Destiladores Herzog HDA 628/627	1,03	1,6	1,04
PFE	Destiladores Herzog HDA 628/627	0,76	4,3	0,85
% grupos químicos	CG-FID VARIAN CP-3800	< 1,0%	< 1,0%	< 1,0%

FONTE: LACAUT_{ets} (2007)

NOTA: A variação indicada refere-se aos desvios provenientes de ensaios de reprodutibilidade.

A tabela 19 mostra que no ano de 2006, ocorreu um aumento no desvio de reprodutibilidade da propriedade PFE (ponto final de ebulição), indicando algum problema com os destiladores, o qual foi corrigido, pois o desvio diminuiu no outro ano. Este desvio também indica que, para esta propriedade, os desvios de modelagem devem ser maiores que 4,3%. Não é possível que uma previsão que utiliza um modelo matemático, seja mais precisa que o próprio equipamento.

É importante que o técnico seja muito bem treinado, e que os equipamentos utilizados sejam calibrados e vistoriados durante a sua limpeza, aplicando-se manutenção preventiva sempre que possível. Os ensaios de repetitividade e reprodutibilidade devem ser realizados em intervalos curtos (por exemplo a cada mês) de acordo com a disponibilidade de cada equipamento, possibilitando a detecção de problemas os quais devem ser corrigidos. Desta maneira pode-se garantir uma boa qualidade nos resultados e, conseqüentemente, no banco de dados gerado para modelagem.

A variabilidade existente entre as amostras é interessante para aplicação em modelagem, pois o que interessa na realidade é abranger uma boa parcela da população original. Quanto maior a faixa de variação da propriedade sob estudo, melhor a representatividade populacional, e o modelo ajustado neste intervalo pode ser usado para prever as propriedades com melhor capacidade preditiva. Na tabela 20 está apresentada a faixa de variação, dos valores de cada propriedade, entre as 128 amostras coletadas no período.

TABELA 20 – FAIXA DE VARIAÇÃO DAS PROPRIEDADES DAS AMOSTRAS DE GASOLINA COLETADAS.

Propriedade	Especificação (portaria n. 309)	Faixa de variação	Média
Massa específica, kg/m ³	- x -	736,9 - 768,0	754,6
Pressão de vapor Reid, kPa, máx.	69,0	18,4 - 66,3	49,5
Curva de destilação: T ₁₀ °C, máx.	65,0	50,1 - 75,1	56,6
Curva de destilação: T ₅₀ °C, máx.	80,0	64,7 - 76,0	72,3
Curva de destilação: T ₉₀ °C, mín.-máx.	145,0 - 190,0	98,1 - 190,6	158,4
Curva de destilação: T _{PFE} °C, máx.	220,0	135,0 - 327,9	211,3
% aromáticos, máx.	45,0	1,3 - 19,4	14,4
% parafínicos	- x -	8,5 - 22,8	11,8
% isoparafínicos	- x -	10,4 - 27,0	16,5
% naftênicos	- x -	9,9 - 46,2	15,7
% olefínicos, máx.	30,0	0,3 - 19,2	12,4
% oxigenados	- x -	18,3 - 45,6	26,0

6.3.2 Regressão Linear Múltipla

A primeira ferramenta matemática a ser aplicada em um banco de dados para modelagem, usualmente, é a mais simples de todas. A regressão linear múltipla foi escolhida pela facilidade de aplicação do programa. Como era de se esperar, o problema de colinearidade apresentou-se neste caso. Tem-se uma matriz de 128 amostras x 1588 absorvâncias e, para esta ferramenta, a matriz deve ser quadrada, sem repetição de informação. Duas opções de enquadramento em condições ideais são possíveis:

- a) redução das variáveis a 128 absorvâncias, obtendo-se uma matriz [128 x 128];
- b) coleta de mais 1460 amostras para formar outra matriz **X** de dimensões [1588 x 1588].

Observa-se que a opção (b) é inviável economicamente e em termos práticos, pois obter esta enorme quantidade de amostras diferentes umas das outras, exigiria um período prolongado de coleta. A opção (a) seria uma boa escolha, porém não se deseja um aprofundamento nesta técnica em particular, pois tem-se o PCR e PLS que poderão resolver este problema rapidamente, sem mudar a matriz **X** inicial.

De qualquer maneira observou-se que a inversão da matriz **X**, que é a solução desejada do sistema de equações, produziu um modelo com excesso de parâmetros. Este excesso de parâmetros é visualizado nas figuras 107 e 108, podendo ser interpretado como um “super ajuste” no treinamento. O termo em inglês bastante citado na literatura é o “overfitting”, no qual o ajuste dos pontos é excelente, porém este tipo de modelo não pode ser usado para previsão, já que os desvios de previsão para um novo conjunto de dados tende a valores muito alto. As figuras 107 e 108 mostram o “super ajuste” de todos os pontos do treinamento, com 90 amostras, já que o valor previsto da propriedade é igual ao valor experimental, com RMSEC próximo a zero. Os desvios altos de previsão estão representados pelo RMSECV, que retira alguns pontos do próprio modelo para teste.

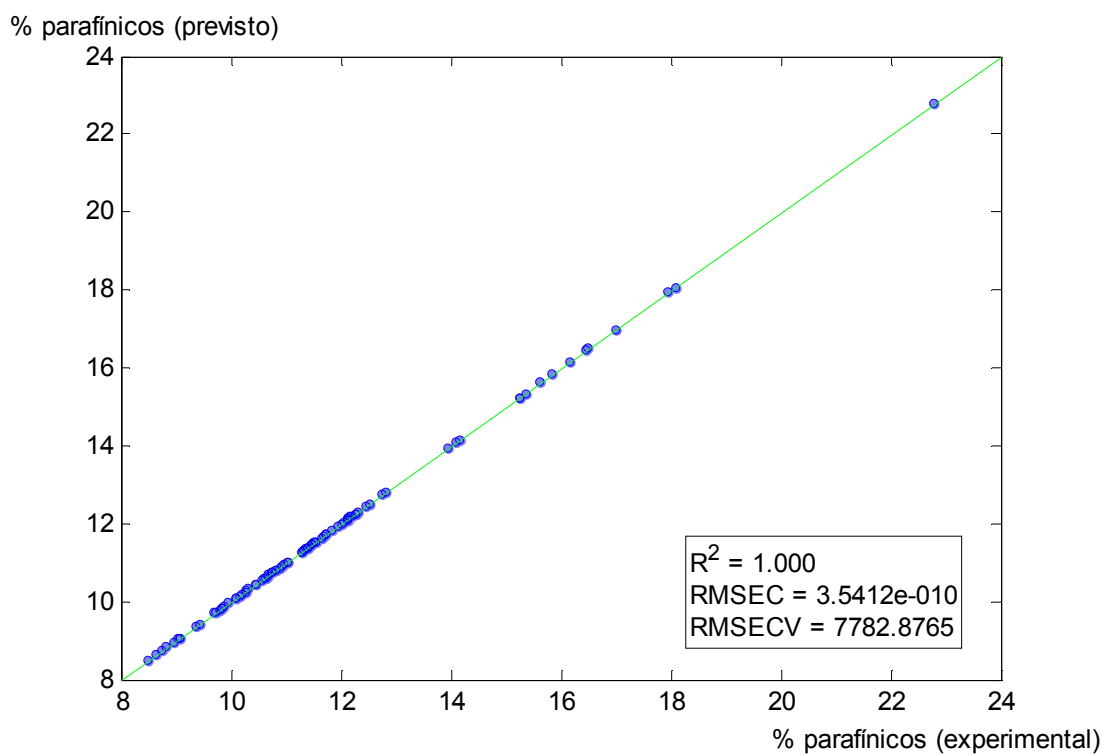


FIGURA 107 – GRÁFICO DOS VALORES PREVISTOS X EXPERIMENTAIS DO TEOR DE PARAFÍNICOS.

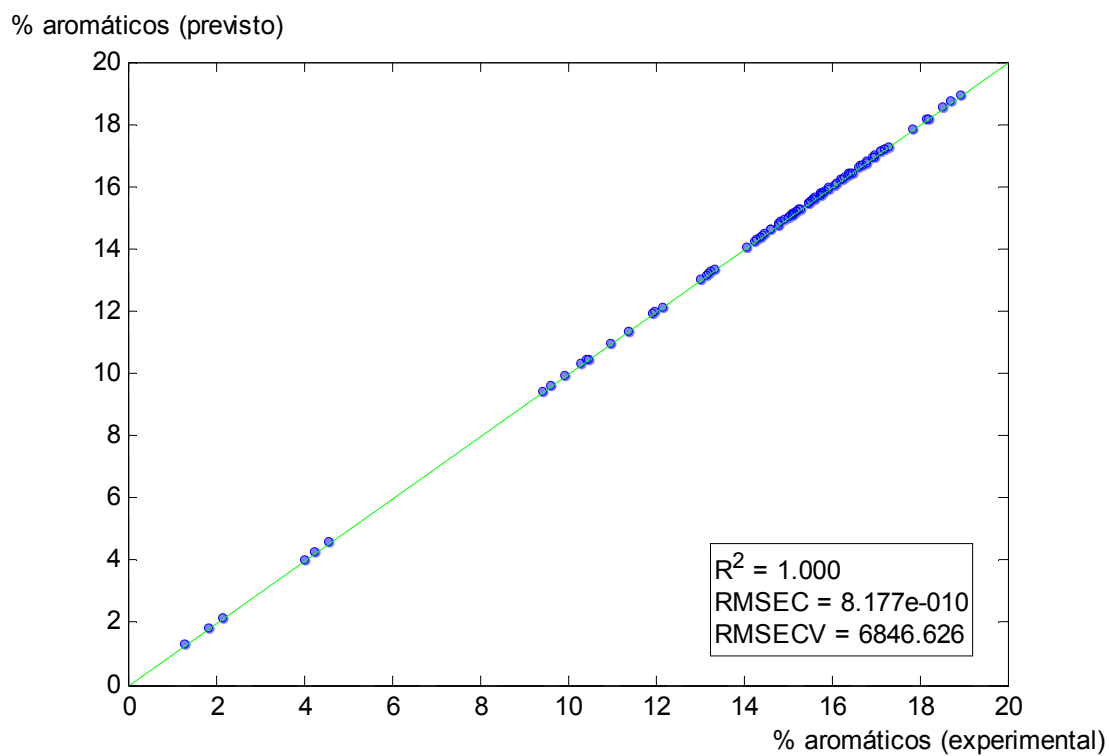


FIGURA 108 – GRÁFICO DOS VALORES PREVISTOS X EXPERIMENTAIS DO TEOR DE AROMÁTICOS.

6.3.3 PLS e PCR

As amostras receberam uma numeração diferenciada como GA01 a GA22 para gasolinas aditivadas e, GC01 a GC107 para gasolinas comuns. Uma das amostras foi descartada imediatamente (GC06) pois o perfil químico era muito diferente das demais (sem presença de álcool), influenciando negativamente a modelagem. O conjunto de 128 amostras foi misturado de maneira randômica, para criar o grupo de treinamento, com 90 amostras e outro com 38 amostras para formar o grupo de teste. Desta maneira a representatividade do banco inicial estaria nos subgrupos. Tabelas contendo os valores das propriedades e composição química de amostras estão apresentadas no apêndice A. A matriz dos espectros de cada amostra, por ser muito extensa, está gravada no CD em anexo, no formato ASCII ou .DAT.

Com o *toolbox* PLS da *Eigenvector Research* versão 7.4.0 para o MATLAB R2007a, ambos licenciados para o LACAUT_{ets}, aplicou-se o pré-tratamento na matriz **X** de treinamento: autoescalamento, segunda derivada, alisamento e ortogonalização. Agora a dimensão da matriz de treinamento é de [90 x 1588], enquanto que a matriz **Y** possui dimensão [90 x 1] para cada propriedade.

O ajuste dos dados para o PLS ocorreu para todas as propriedades, com o número de variáveis latentes de 3 a 4 em média. A escolha do número de variáveis latentes foi o passo crítico no desenvolvimento de cada modelo. No geral, se um número insuficiente de VL é utilizado, o modelo terá pouca precisão, enquanto que se um número maior do que o necessário for usado, ruído instrumental terá importância significativa na previsão do conjunto de teste. De qualquer modo, pôde-se verificar se os modelos estão ou não robustos, apresentando o banco de teste para previsão. Para cada ponto previsto é calculado um desvio relativo, que é a diferença entre o ponto experimental e o calculado pelo modelo, comparado com o valor experimental:

$$\text{Desvio} = 100 \cdot (\text{calculado} - \text{experimental}) / \text{experimental} \quad (6.22)$$

Após o ajuste dos pontos, foi necessário aplicar outras duas regras que identificam *outliers* (*leverage* e resíduo de *Student*) e retirá-los dos modelos. Ao aplicá-los aos modelos completos com 90 amostras, observou-se que cada vez mais seria necessário retirar amostras. Com isso o banco de dados inicial foi diminuindo,

perdendo sua representatividade, chegando a um número muito pequeno de amostras (como exemplo, para aromáticos 30 amostras somente). Isto é um efeito conhecido como “bola de neve” e não é desejado.

Para contornar este problema, decidiu-se manter o número máximo de amostras, mesmo que os critérios estatísticos para as amostras estivessem indicando uma eliminação. O que foi observado, principalmente em propriedades com estreita faixa de valores, como por exemplo a massa específica e o T_{50} , é que os modelos obtidos estão bem ajustados e qualquer pequena variação de previsão é indicada como uma grande variação na estatística. A avaliação pelos critérios estatísticos não ficou invalidada, pois a mesma foi aplicada a todos os modelos, sendo retirados alguns pontos, durante o treinamento, que interferiam na capacidade preditiva dos modelos.

No apêndice B estão apresentados os detalhes de cada modelo gerado, bem como o gráfico de propriedade experimental *versus* previsto. No apêndice C estão apresentadas as tabelas de previsão de treinamento, também no formato .pdf em mídia digital. Matematicamente ocorreu a redução de 1588 variáveis (transmitância em cada ponto) para 3 ou 4 variáveis latentes que representam toda a informação química obtida no espectro IV.

6.3.3.1 Massa específica

O ajuste dos dados foi bastante satisfatório para esta propriedade, aplicando-se o PLS ou PCR. Na tabela 21 encontram-se os dados de previsão de cada modelo obtido e as figuras 109 e 110 apresentam os desvios de previsão de cada ponto, correspondente às colunas 6 e 9 da tabela 21. Um ponto não está representado no gráfico para não alterar a escala do mesmo. O ponto não representado nos gráficos possui desvio grande em relação aos outros, e está marcado na cor laranja na tabela que o contém.

Os modelos PLS e PCR apresentaram um desempenho similar com relação ao número de pontos para treinamento e teste. O número de variáveis latentes e componentes principais foi de 3 e 4 respectivamente, com 90 amostras utilizadas no treinamento, sem descarte de pontos, ainda que os critérios estatísticos de *leverage* e resíduo de *Student* indicaram eliminação de alguns pontos.

TABELA 21 - DADOS DO CONJUNTO DE TESTE PARA A MASSA ESPECÍFICA E MODELOS PLS E PCR.

Amostra	Nº.	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GA05	1	754,6	753,4	1,2	0,2	753,4	1,2	0,2
GC08	2	757,4	755,9	1,5	0,2	755,9	1,5	0,2
GC50	3	760,5	760,1	0,4	0,0	760,1	0,4	0,0
GA03	4	753,3	751,8	1,5	0,2	751,8	1,5	0,2
GC92	5	748,3	749,4	-1,1	-0,1	749,4	-1,1	-0,1
GC21	6	755,5	758,3	-2,8	-0,4	758,3	-2,8	-0,4
GA04	7	753,4	752,7	0,7	0,1	752,7	0,7	0,1
GC04	8	753,2	753,4	-0,2	0,0	753,4	-0,2	0,0
GC45	9	756,8	757,3	-0,5	-0,1	757,3	-0,5	-0,1
GC40	10	753,6	753,6	0,0	0,0	753,6	0,0	0,0
GC52	11	742,7	746,9	-4,2	-0,6	746,9	-4,2	-0,6
GC105	12	754,5	754,6	-0,1	0,0	754,6	-0,1	0,0
GC36	13	755,6	754,8	0,8	0,1	754,8	0,8	0,1
GC41	14	741,5	747,7	-6,2	-0,8	747,7	-6,2	-0,8
GC33	15	759,0	761,1	-2,1	-0,3	761,1	-2,1	-0,3
GC83	16	741,2	758,7	-17,5	-2,4	758,7	-17,5	-2,4
GC24	17	753,5	753,0	0,5	0,1	753,0	0,5	0,1
GC51	18	750,1	755,1	-5,0	-0,7	755,1	-5,0	-0,7
GC22	19	751,9	751,9	0,0	0,0	751,9	0,0	0,0
GA20	20	753,6	753,3	0,3	0,0	753,3	0,3	0,0
GC82	21	755,8	757,3	-1,5	-0,2	757,3	-1,5	-0,2
GC71	22	761,7	762,1	-0,4	-0,1	762,1	-0,4	-0,1
GC94	23	759,1	757,7	1,4	0,2	757,7	1,4	0,2
GC97	24	754,4	755,5	-1,1	-0,1	755,5	-1,1	-0,1
GA11	25	760,8	760,9	-0,1	0,0	760,9	-0,1	0,0
GC49	26	754,7	753,1	1,6	0,2	753,1	1,6	0,2
GC19	27	751,0	753,4	-2,4	-0,3	753,4	-2,4	-0,3
GC15	28	749,0	751,0	-2,0	-0,3	751,0	-2,0	-0,3
GC66	29	746,9	749,5	-2,6	-0,4	749,5	-2,6	-0,4
GC55	30	743,9	746,3	-2,4	-0,3	746,3	-2,4	-0,3
GC32	31	756,4	757,1	-0,7	-0,1	757,1	-0,7	-0,1
GC88	32	757,3	759,8	-2,5	-0,3	759,8	-2,5	-0,3
GC103	33	754,8	754,3	0,5	0,1	754,3	0,5	0,1
GC43	34	753,2	754,0	-0,8	-0,1	754,0	-0,8	-0,1
GC23	35	754,4	754,6	-0,2	0,0	754,6	-0,2	0,0
GC30	36	758,3	757,3	1,0	0,1	757,3	1,0	0,1
GC02	37	766,3	764,4	1,9	0,2	764,4	1,9	0,2
GA10	38	755,9	758,9	-3,0	-0,4	758,9	-3,0	-0,4

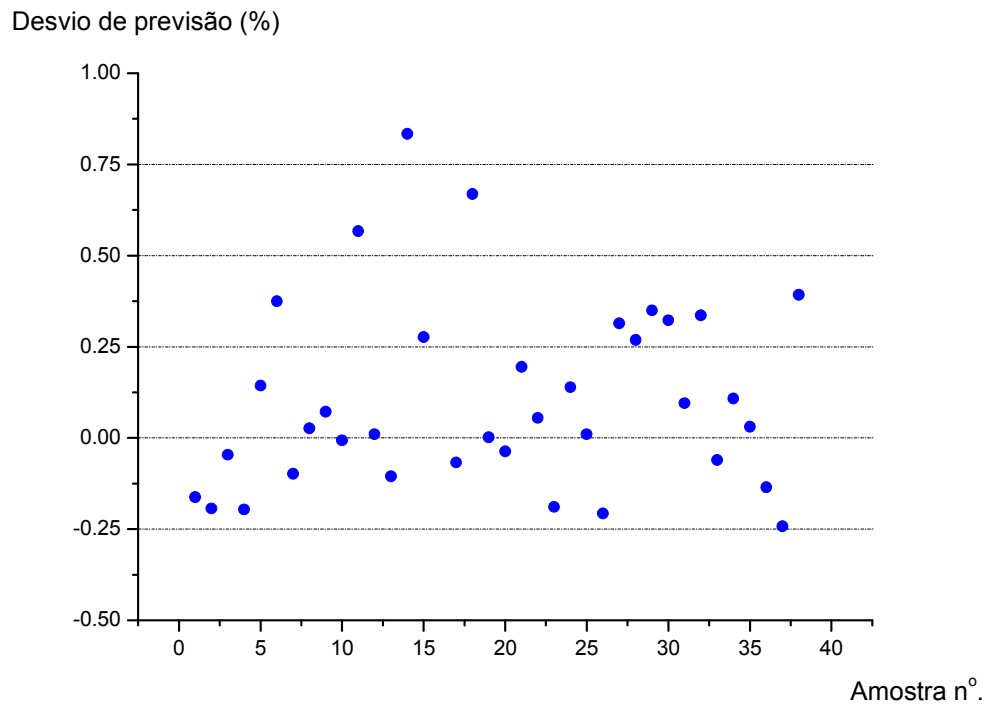


FIGURA 109 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PLS PARA MASSA ESPECÍFICA

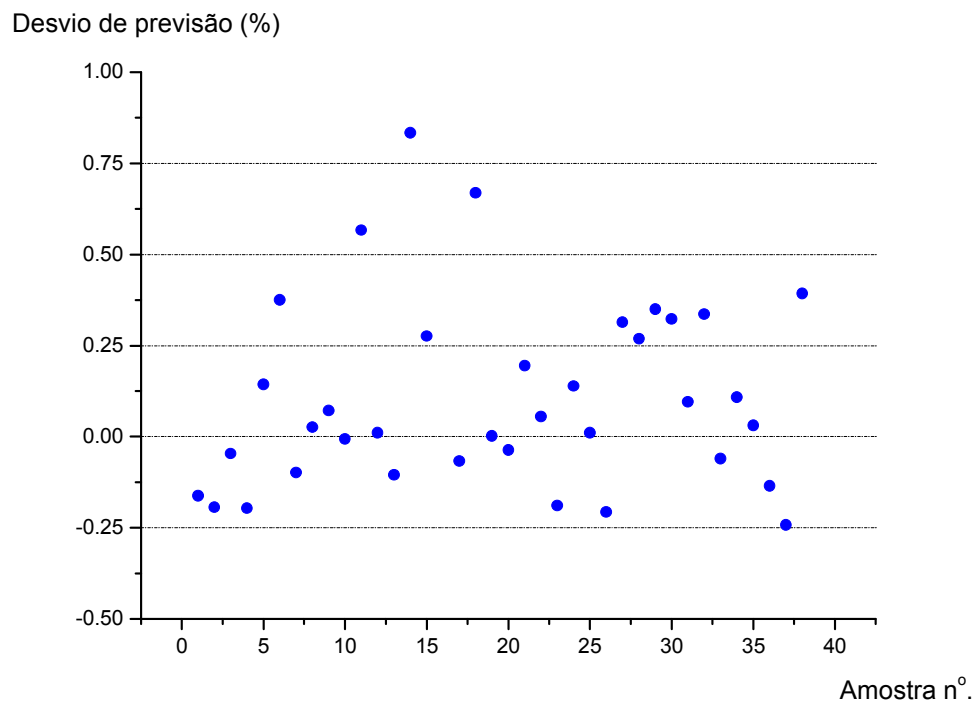


FIGURA 110 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PCR PARA MASSA ESPECÍFICA

O ponto 16 possui um desvio de previsão de -2,4%, bastante diferente da média, com um valor nominal de $741,2 \text{ kg/m}^3$, sendo o mais baixo valor do banco de dados de teste. Isto indica que a previsão não está boa na faixa inicial em ambos os modelos, e pode ser visualizado no gráfico da propriedade experimental *versus* prevista apresentada no apêndice B, no qual a densidade de pontos nesta região é bem pequena. Apesar disso, outros pontos tais como os pontos 11, 14 e 18, que caem nessa faixa, tiveram desvios baixos (0,6%, -0,8% e -0,7%). Contudo, observa-se que estes desvios não são tão baixos quanto à maioria dos pontos de teste. Conclui-se que os modelos PLS e PCR para esta propriedade são satisfatórios para previsão na faixa de $738,0$ a $768,0 \text{ kg/m}^3$, porém possuem menor capacidade preditiva na faixa de $738,0$ a $750,0 \text{ kg/m}^3$, que é a faixa de menor densidade de pontos para este modelo.

6.3.3.2 Pressão de vapor REID

Uma parada para manutenção do aparelho de pressão de vapor por quatro meses fez com que o número total de amostras fosse reduzido para 106 amostras. Porém este número de amostras não afetou o ajuste dos modelos PLS e PCR, com boa faixa de aplicação que vai de $17,0$ a $65,0 \text{ kPa}$. O modelo PLS utilizou 4 variáveis latentes para representar a informação presente nos espectros de IV, sem necessidade de descarte de pontos. O modelo PCR utilizou 4 componentes principais, porém o desempenho com o conjunto de teste foi inferior aos do modelo PLS.

Na tabela 22, observa-se que a maioria dos pontos estão com desvios de previsão aceitáveis para esta propriedade (a maioria com erros abaixo de 4 ou 5% para o PLS), pois a pressão de vapor está relacionada com o teor de compostos voláteis presentes na gasolina. Isto quer dizer que existe uma grande facilidade de ocorrer perda de voláteis durante o manuseio das amostras, inserindo erros aleatórios nos modelos.

O ponto 11 foi retirado dos gráficos por apresentar desvios maiores em relação aos outros pontos e está marcado em laranja na tabela 24. Observa-se que existem pontos com desvios um pouco maiores que a média para o modelo PLS,

tais como os pontos 3, 9 e 22, indicando que os modelos possuem capacidade preditiva reduzida fora da faixa de 50,0 a 55,0 kPa.

TABELA 22 - DADOS DO CONJUNTO DE TESTE PARA A PV REID E MODELO PLS E PCR.

Amostra	Nº.	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GA05	1	50,2	51,8	1,6	3,3	50,5	0,3	0,6
GC50	2	48,9	48,8	0,1	-0,1	48,3	-0,6	-1,2
GC92	3	27,5	29,7	-2,2	8,0	26,9	-0,6	-2,3
GC45	4	53,1	55,4	-2,3	4,3	54,5	1,4	2,7
GC40	5	52,2	52,7	-0,5	1,0	54,7	2,5	4,9
GC52	6	66,3	62,9	3,4	-5,2	61,8	-4,5	-6,8
GC105	7	59,0	58,5	0,5	-0,8	60,0	1,0	1,7
GC36	8	50,1	51,6	-1,5	3,0	53,6	3,5	6,9
GC41	9	40,0	43,5	-3,5	8,8	45,2	5,2	13,0
GC33	10	52,8	50,3	2,5	-4,8	50,9	-1,9	-3,6
GC83	11	60,3	48,7	11,6	-19,2	53,4	-6,9	-11,5
GC24	12	52,5	53,8	-1,3	2,5	53,5	1,0	1,9
GC51	13	52,6	52,1	0,5	-0,9	52,8	0,2	0,3
GA20	14	52,7	53,4	-0,7	1,3	53,7	1,0	1,9
GC82	15	52,3	49,1	3,2	-6,1	50,3	-2,0	-3,7
GC71	16	50,4	50,3	0,1	-0,2	51,4	1,0	1,9
GC94	17	32,3	31,9	0,4	-1,4	30,4	-1,9	-5,8
GC97	18	42,6	43,1	-0,5	1,2	41,8	-0,8	-1,9
GA11	19	51,8	50,8	1,0	-2,0	51,8	0,0	0,1
GC49	20	50,8	53,0	-2,2	4,4	53,1	2,3	4,5
GC66	21	26,0	25,1	0,9	-3,4	22,2	-3,8	-14,7
GC55	22	40,2	42,7	-2,5	6,3	45,3	5,1	12,7
GC32	23	53,0	52,0	1,0	-1,9	51,0	-2,0	-3,8
GC88	24	25,9	27,0	-1,1	4,1	26,8	0,9	3,4
GC103	25	58,1	57,2	0,9	-1,5	58,7	0,6	1,0
GC43	26	52,8	51,2	1,6	-3,0	50,4	-2,4	-4,5
GC23	27	53,0	54,4	-1,4	2,7	53,3	0,3	0,6
GC30	28	51,6	53,6	-2,0	4,0	52,3	0,7	1,5
GA10	29	53,4	50,0	3,4	-6,4	50,6	-2,8	-5,2

A dispersão dos pontos de previsão em ambos os gráficos, nas figuras 111 e 112, parece estar uniforme, indicando que os modelos gerados não possuem tendências para certos grupos de amostras usadas para treinamento. O modelo PCR possui capacidade preditiva menor que o modelo PLS, já que os desvios são maiores, conforme comparação direta dos desvios nas figuras 107 e 108. Conforme o exposto acima, conclui-se que o modelo PLS poderá ser utilizado para previsão da PV Reid, mesmo com capacidade preditiva reduzida, fora da faixa de 50,0 a 55,0 kPa.

Desvio de previsão (%)

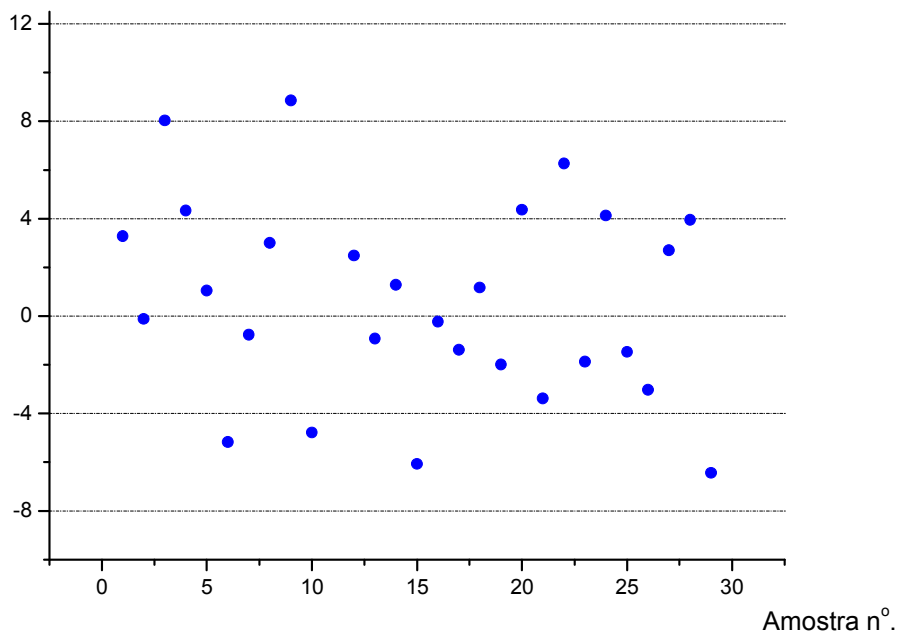


FIGURA 111 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PLS PARA PRESSÃO DE VAPOR REID

Desvio de previsão (%)

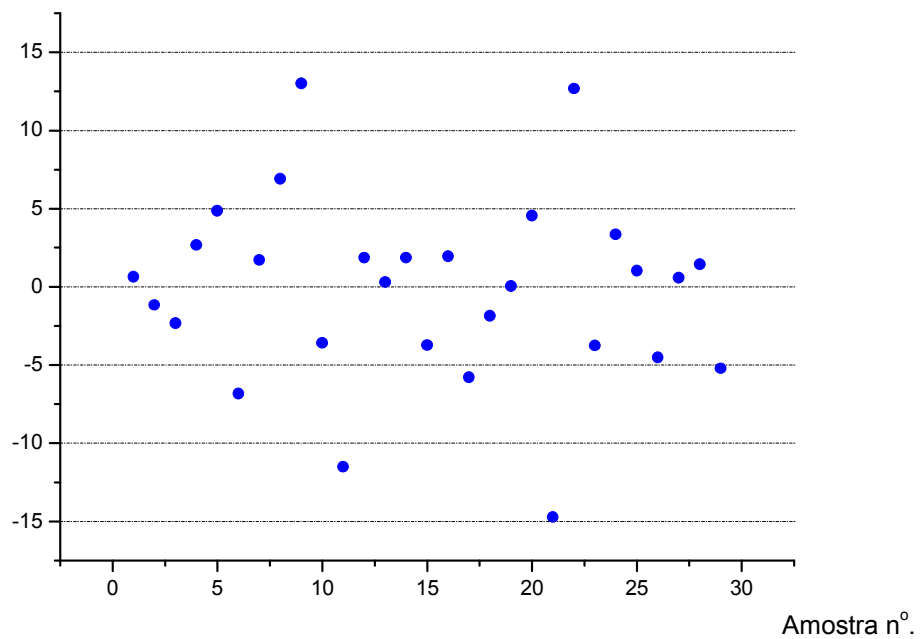


FIGURA 112 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PCR PARA PRESSÃO DE VAPOR REID

6.3.3.3 Curva de destilação: T₁₀

Este ponto da curva de destilação está relacionado com o teor de compostos voláteis presentes na gasolina. Conseqüentemente, a mesma dificuldade encontrada para a PV Reid aconteceu, devido à facilidade de perdas de voláteis no manuseio das amostras. Necessitou-se de 6 variáveis latentes para montagem do modelo PLS, com descarte de dois pontos que estavam atrapalhando o ajuste (pontos 12 e 59 do conjunto de treinamento). O modelo PCR utilizou 7 componentes principais para o ajuste, com desempenho inferior ao PLS, tanto no ajuste dos dados de treinamento, quanto para os dados de teste. A tabela 23 mostra os desvios de previsão do conjunto de teste para ambos os modelos. Apesar da dificuldade de ajuste, os desvios de previsão, na sua maioria, ficaram abaixo de 5% para o PLS.

TABELA 23 - DADOS DO CONJUNTO DE TESTE PARA T₁₀ E MODELOS PLS E PCR.

Amostra	N°.	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	CONTINUA
								Desvio relativo PCR (%)
GA05	1	56,0	54,7	-1,3	-2,3	55,1	-0,9	-1,5
GC08	2	56,0	52,6	-3,4	-6,0	51,7	-4,3	-7,7
GC50	3	55,6	56,1	0,5	0,9	56,4	0,8	1,5
GA03	4	54,9	54,2	-0,7	-1,2	53,6	-1,3	-2,3
GC92	5	68,9	66,2	-2,7	-4,0	69,1	0,2	0,2
GC21	6	56,6	58,5	1,9	3,4	58,1	1,5	2,7
GA04	7	55,8	55,4	-0,4	-0,7	54,9	-0,9	-1,6
GC04	8	55,4	55,7	0,3	0,6	55,3	-0,1	-0,2
GC45	9	55,4	54,3	-1,1	-2,0	54,9	-0,5	-0,9
GC40	10	55,4	54,7	-0,7	-1,2	53,4	-2,0	-3,7
GC52	11	50,1	53,1	3,0	6,0	52,8	2,7	5,5
GC105	12	51,7	54,2	2,5	4,9	54,2	2,5	4,9
GC36	13	55,1	55,1	0,0	0,1	54,5	-0,6	-1,1
GC41	14	59,8	64,1	4,3	7,3	62,3	2,5	4,1
GC33	15	54,2	56,6	2,4	4,4	56,1	1,9	3,6
GC83	16	51,7	59,0	7,3	14,1	57,6	5,9	11,5
GC24	17	54,9	55,8	0,9	1,6	55,5	0,6	1,1
GC51	18	59,5	54,2	-5,3	-8,9	53,7	-5,8	-9,8
GC22	19	54,1	55,2	1,1	2,1	55,0	0,9	1,7
GA20	20	53,4	54,2	0,8	1,6	53,9	0,5	0,9
GC82	21	55,2	57,1	1,9	3,5	55,6	0,4	0,7
GC71	22	56,7	55,9	-0,8	-1,5	56,6	-0,1	-0,2
GC94	23	65,6	66,5	0,9	1,3	66,9	1,3	2,0
GC97	24	61,1	60,5	-0,6	-0,9	62,3	1,2	2,0
GA11	25	54,9	57,8	2,9	5,3	57,5	2,6	4,7
GC49	26	55,0	54,7	-0,3	-0,6	54,4	-0,6	-1,1

Amostra	N°.	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	CONCLUSÃO		
						Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GC19	27	54,4	55,6	1,2	2,2	56,2	1,8	3,3
GC15	28	55,5	54,8	-0,7	-1,3	54,3	-1,2	-2,2
GC66	29	69,4	70,5	1,1	1,6	71,0	1,6	2,4
GC55	30	61,3	62,8	1,5	2,4	59,2	-2,1	-3,5
GC32	31	54,6	54,0	-0,6	-1,2	54,6	0,0	0,1
GC88	32	70,5	70,1	-0,4	-0,5	69,5	-1,0	-1,4
GC103	33	52,2	54,1	1,9	3,6	54,0	1,8	3,4
GC43	34	54,7	56,3	1,6	3,0	56,4	1,7	3,1
GC23	35	56,1	55,1	-1,0	-1,8	55,1	-1,0	-1,8
GC30	36	54,4	54,2	-0,2	-0,4	55,3	0,9	1,7
GC02	37	57,3	56,6	-0,7	-1,3	56,6	-0,7	-1,3
GA10	38	55,3	56,8	1,5	2,7	56,6	1,3	2,4

Verifica-se nas figuras 113 e 114 que a capacidade preditiva de ambos os modelos está distribuída por quase toda a faixa de trabalho (de 50,0 a 76,0 °C), já que os modelos podem prever com boa precisão, aqueles pontos que estão fora da densa área de pontos de treinamento (54,0 a 60,0 °C). Os pontos que apresentaram desvios grandes foram os pontos 16 e 18, os quais possuem valores nominais dentro da faixa de previsão. O ponto 16 vem apresentando problemas em outras previsões das propriedades físicas, e o que se pode inferir é que o seu espectro no IV é um pouco diferente ou com mais ruído do que as outras amostras.

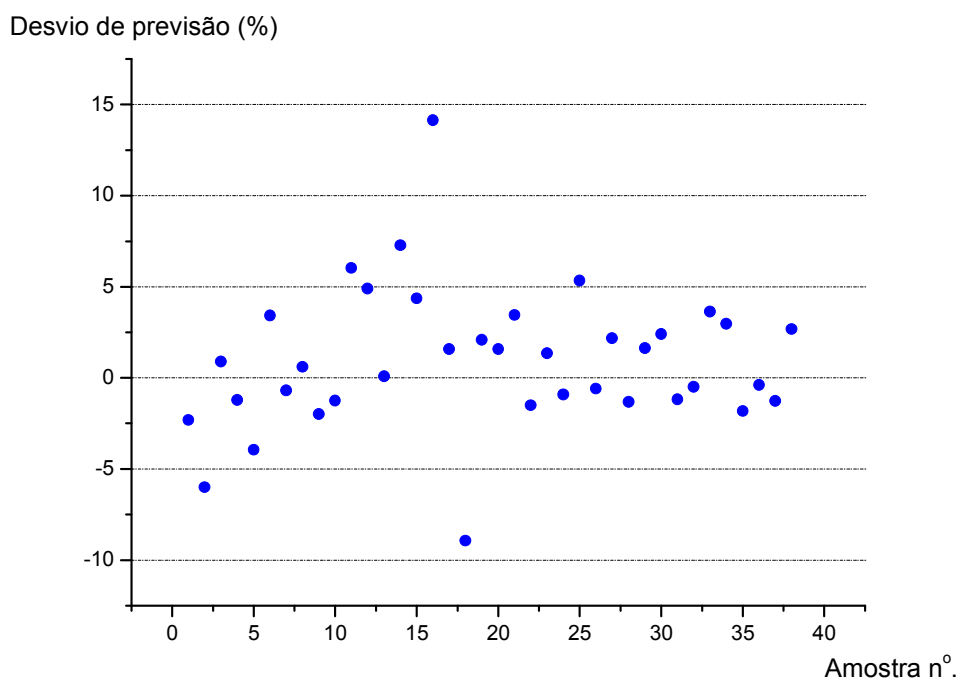


FIGURA 113 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PLS PARA T_{10} DA CURVA DE DESTILAÇÃO

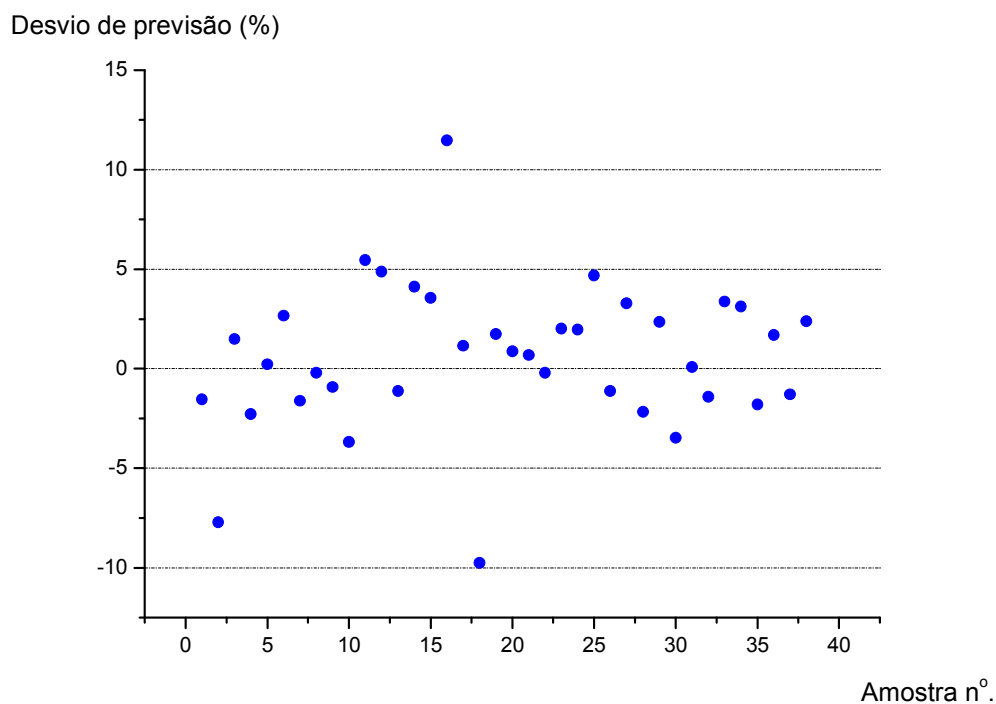


FIGURA 114 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PCR PARA T_{10} DA CURVA DE DESTILAÇÃO

Com uma capacidade preditiva melhor que o modelo PCR, o modelo PLS poderá ser utilizado para prever a propriedade T_{10} da curva de destilação, com boa capacidade extrapolativa.

6.3.3.4 Curva de destilação: T_{50}

O ajuste dos dados também foi bastante satisfatório para esta propriedade, com leve vantagem para o modelo PLS e sem descarte de pontos na fase de treinamento. Na tabela 24 encontram-se os dados de previsão de cada modelo obtido e o ponto 16 foi retirado do gráfico e marcado em laranja. As figuras 115 e 116 apresentam os desvios de previsão de cada ponto.

TABELA 24 - DADOS DO CONJUNTO DE TESTE PARA T₅₀ E MODELOS PLS E PCR.

Amostra N°.	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)	
GA05	1	72,4	72,3	-0,1	-0,2	72,2	-0,2	-0,2
GC08	2	73,7	72,3	-1,4	-1,9	72,3	-1,4	-1,9
GC50	3	72,8	73,1	0,3	0,4	73,1	0,3	0,4
GA03	4	72,1	71,8	-0,3	-0,4	71,8	-0,3	-0,4
GC92	5	70,9	69,9	-1,0	-1,5	69,9	-1,0	-1,4
GC21	6	72,8	73,4	0,6	0,8	73,4	0,6	0,8
GA04	7	72,3	72,3	0,0	0,0	72,3	0,0	0,0
GC04	8	72,4	72,3	-0,1	-0,2	72,2	-0,2	-0,2
GC45	9	73,1	72,6	-0,5	-0,7	72,6	-0,5	-0,7
GC40	10	72,4	71,9	-0,5	-0,7	71,9	-0,5	-0,7
GC52	11	70,7	71,2	0,5	0,7	71,2	0,5	0,8
GC105	12	71,9	72,1	0,2	0,3	72,2	0,3	0,4
GC36	13	72,1	72,1	0,0	0,0	72,1	0,0	0,0
GC41	14	68,2	69,4	1,2	1,8	69,5	1,3	1,9
GC33	15	73,3	73,8	0,5	0,7	73,8	0,5	0,6
GC83	16	69,9	74,3	4,4	6,3	74,4	4,5	6,4
GC24	17	72,6	72,2	-0,4	-0,6	72,1	-0,5	-0,6
GC51	18	71,2	72,5	1,3	1,8	72,5	1,3	1,8
GC22	19	72,0	72,1	0,1	0,2	72,1	0,1	0,1
GA20	20	72,7	72,5	-0,2	-0,3	72,5	-0,2	-0,3
GC82	21	72,8	71,8	-1,0	-1,4	71,9	-0,9	-1,3
GC71	22	73,6	74,1	0,5	0,6	74,0	0,4	0,6
GC94	23	71,8	72,1	0,3	0,4	72,2	0,4	0,5
GC97	24	72,1	69,9	-2,2	-3,1	70,0	-2,1	-2,9
GA11	25	73,4	73,7	0,3	0,4	73,7	0,3	0,4
GC49	26	72,6	72,4	-0,2	-0,3	72,4	-0,2	-0,3
GC19	27	71,7	72,1	0,4	0,6	72,1	0,4	0,6
GC15	28	71,2	71,9	0,7	1,0	71,9	0,7	0,9
GC66	29	71,3	72,2	0,9	1,2	72,0	0,7	1,0
GC55	30	71,5	72,2	0,7	1,0	72,3	0,8	1,2
GC32	31	72,1	72,3	0,2	0,2	72,3	0,2	0,2
GC88	32	74,7	73,1	-1,6	-2,1	73,2	-1,5	-2,0
GC103	33	71,9	71,7	-0,2	-0,3	71,8	-0,1	-0,1
GC43	34	72,1	72,5	0,4	0,6	72,5	0,4	0,6
GC23	35	72,7	72,4	-0,3	-0,3	72,4	-0,3	-0,4
GC30	36	73,0	72,5	-0,5	-0,7	72,5	-0,5	-0,7
GC02	37	74,5	74,0	-0,5	-0,7	74,0	-0,5	-0,7
GA10	38	72,1	73,0	0,9	1,3	73,0	0,9	1,2

Os modelos PLS e PCR apresentaram um desempenho similar com relação ao número de pontos para treinamento e teste. O número de variáveis latentes e componentes principais foi de 2 e 4 respectivamente, com 90 amostras utilizadas no treinamento.

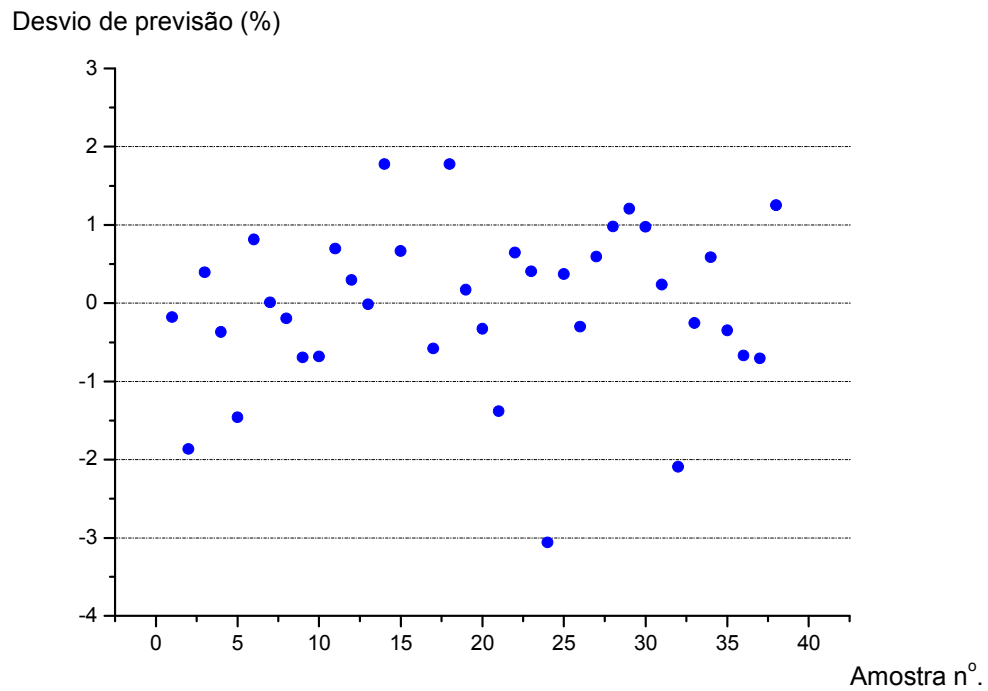


FIGURA 115 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PLS PARA T_{50} DA CURVA DE DESTILAÇÃO

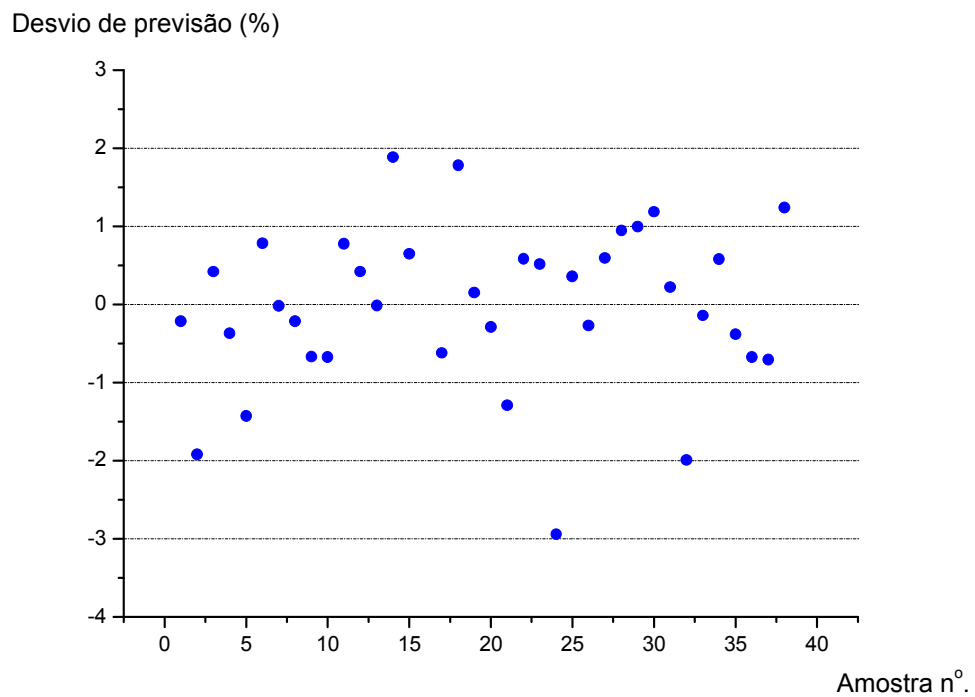


FIGURA 116 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PCR PARA T_{50} DA CURVA DE DESTILAÇÃO

Embora exista uma faixa densa de pontos entre 72,0 e 74,0°C, todos os pontos do conjunto de teste tiveram pequenos desvios de previsão, mostrando que os modelos gerados possuem capacidade extrapolativa para a faixa de valores de 65,0 a 76,0°C. O ponto 16 também apresentou o maior desvio, indicando que além de estar na faixa extrapolativa do modelo PLS, pode ter algum problema no espectro do IV, já que o mesmo apareceu com problemas de previsão em quase todos os modelos. Contaminação da célula de medição foi descartada porque a previsão também foi aplicada para sua replicata e os resultados de previsão também foram semelhantes. Observando a composição química desta amostra (GC83), nota-se que o teor de olefínicos está alto (entre os maiores valores do banco de dados) e o teor de naftênicos baixo (menor de todos os outros), além de apresentar alta pressão de vapor Reid. Isto indica que esta gasolina pode ter sido modificada com solvente e sua composição química está bem diferente das outras amostras.

Observando-se as figuras 115 e 116, os desvios de previsão ficaram, na sua maioria, abaixo de 2%, e desta maneira pode-se concluir que os modelos gerados podem ser utilizados para previsão do T_{50} , com vantagem para o modelo PLS e com boa capacidade extrapolativa.

6.3.3.5. Curva de destilação: T_{90}

Para que ocorresse o ajuste dos pontos de treinamento para esta propriedade, foram necessários utilizar 5 variáveis latentes para o modelo PLS e 9 componentes principais para o PCR. Mesmo assim, obteve-se os maiores desvios de previsão em comparação com as outras propriedades físico-químicas da gasolina. Isto se deve ao fato de que ao executar a destilação ASTM, ocorrem mudanças de coloração na gasolina quando a temperatura alcança 100°C. A hipótese de degradação química durante a destilação é plausível (ver figura 117). Uma investigação sobre o assunto foi executada por LANZER, VON MEIEN e YAMAMOTO em 2005 que submeterem os resíduos de destilações incompletas à análise cromatográfica.



FIGURA 117 – ASPECTO VISUAL DE AMOSTRA DE GASOLINA E RESÍDUOS DE DESTILAÇÃO DE 50, 70, 80 E 90%.

FONTE: LANZER, VON MEIEN E YAMAMOTO, (2005)

A análise revelou que ocorreu um aumento na concentração de substâncias pesadas, com o aparecimento de novos picos cromatográficos, revelando-se que pode ter ocorrido a polimerização de olefínicos, formando goma. A formação de goma aumenta o peso molecular médio dos hidrocarbonetos, causando um aumento nas temperaturas no final da curva de destilação. Também é possível que tenha ocorrido uma decomposição térmica de alguns compostos de maior massa molecular. Devido a estes problemas justifica-se a dificuldade de ajuste dos pontos de treinamento para o T_{90} .

TABELA 25 - DADOS DO CONJUNTO DE TESTE PARA T_{90} E MODELOS PLS E PCR.

Amostra	N°.	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	CONTINUA		
						Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GA05	1	162,4	161,6	-0,8	-0,5	162,5	0,1	0,1
GC08	2	167,0	160,8	-6,2	-3,7	170,9	3,9	2,4
GC50	3	187,1	184,6	-2,5	-1,4	178,1	-9,0	-4,8
GA03	4	161,2	162,5	1,3	0,8	163,0	1,8	1,1
GC92	5	103,5	109,0	5,5	5,3	113,8	10,3	10,0
GC21	6	157,7	162,0	4,3	2,7	157,3	-0,4	-0,3
GA04	7	160,9	162,1	1,2	0,7	162,0	1,1	0,7
GC04	8	161,7	162,3	0,6	0,4	161,1	-0,6	-0,4
GC45	9	157,9	158,1	0,2	0,1	153,1	-4,8	-3,0
GC40	10	166,2	166,3	0,1	0,1	169,5	3,3	2,0
GC52	11	157,6	164,1	6,5	4,1	157,7	0,1	0,0
GC105	12	170,7	172,4	1,7	1,0	178,0	7,3	4,3
GC36	13	167,8	166,7	-1,1	-0,7	169,5	1,7	1,0
GC41	14	140,3	148,5	8,2	5,8	142,5	2,2	1,5
GC33	15	163,2	164,8	1,6	1,0	166,1	2,9	1,8
GC83	16	151,0	181,5	30,5	20,2	189,4	38,4	25,4
GC24	17	161,2	160,9	-0,3	-0,2	161,9	0,7	0,4
GC51	18	149,5	160,2	10,7	7,1	157,9	8,4	5,6
GC22	19	161,8	163,9	2,1	1,3	164,5	2,7	1,7

Amostra	N°.	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	CONCLUSÃO		
						Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GA20	20	163,8	166,5	2,7	1,6	163,8	0,0	0,0
GC94	23	182,1	153,7	-28,4	-15,6	154,1	-28,0	-15,4
GC97	24	141,1	136,4	-4,7	-3,3	141,3	0,2	0,2
GA11	25	162,9	164,3	1,4	0,9	165,2	2,3	1,4
GC49	26	162,0	162,2	0,2	0,1	158,1	-3,9	-2,4
GC19	27	163,3	163,3	0,0	0,0	163,5	0,2	0,1
GC15	28	165,8	166,5	0,7	0,4	169,4	3,6	2,2
GC66	29	102,1	112,0	9,9	9,7	112,3	10,2	10,0
GC55	30	149,4	186,7	37,3	24,9	174,3	24,9	16,7
GC32	31	168,7	165,1	-3,6	-2,1	165,7	-3,0	-1,8
GC88	32	129,9	134,1	4,2	3,2	124,7	-5,2	-4,0
GC103	33	170,1	172,0	1,9	1,1	176,6	6,5	3,9
GC43	34	163,4	165,3	1,9	1,2	159,3	-4,1	-2,5
GC23	35	162,0	165,9	3,9	2,4	165,6	3,6	2,2
GC30	36	168,1	166,3	-1,8	-1,1	166,5	-1,6	-1,0
GC02	37	151,3	156,8	5,5	3,6	158,5	7,2	4,7
GA10	38	167,1	167,0	-0,1	-0,1	168,5	1,4	0,8

Os pontos de teste 16, 23 e 30 que tiveram os maiores desvios de previsão mostrado na tabela 25. Isto é possível porque os mesmos estão fora da faixa de alta densidade de pontos de treinamento (160,0 a 180,0°C). Porém outros pontos que estão fora da faixa obtiveram pequenos desvios de previsão. Acredita-se que estas amostras, por serem diferentes do grupo, possam sofrer a reação de polimerização, gerando substâncias diferentes.

Ao verificar as figuras 118 e 119, detectou-se que o modelo PCR com 9 componentes principais obteve os melhores resultados de previsão do conjunto de teste. O modelo PLS, que possui 5 variáveis latentes, também possui boa capacidade preditiva, com desvios de até 5% na maioria dos pontos.

Conforme o exposto nesta seção, pode-se concluir que os modelo PLS e PCR podem ser utilizados para previsão do T_{90} , com boa capacidade extrapolativa.

Desvio de previsão (%)

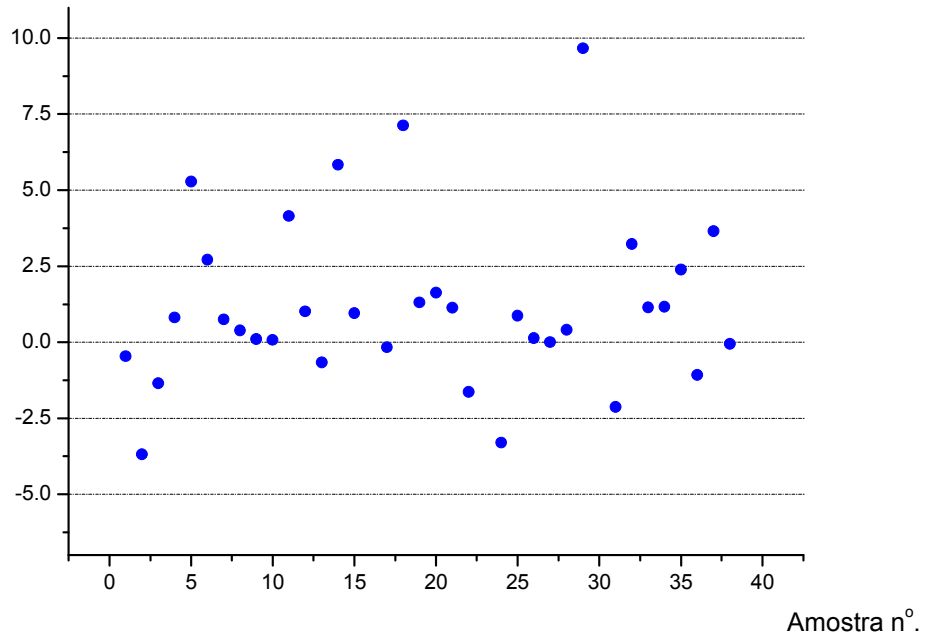


FIGURA 118 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PLS PARA T₉₀ DA CURVA DE DESTILAÇÃO

Desvio de previsão (%)

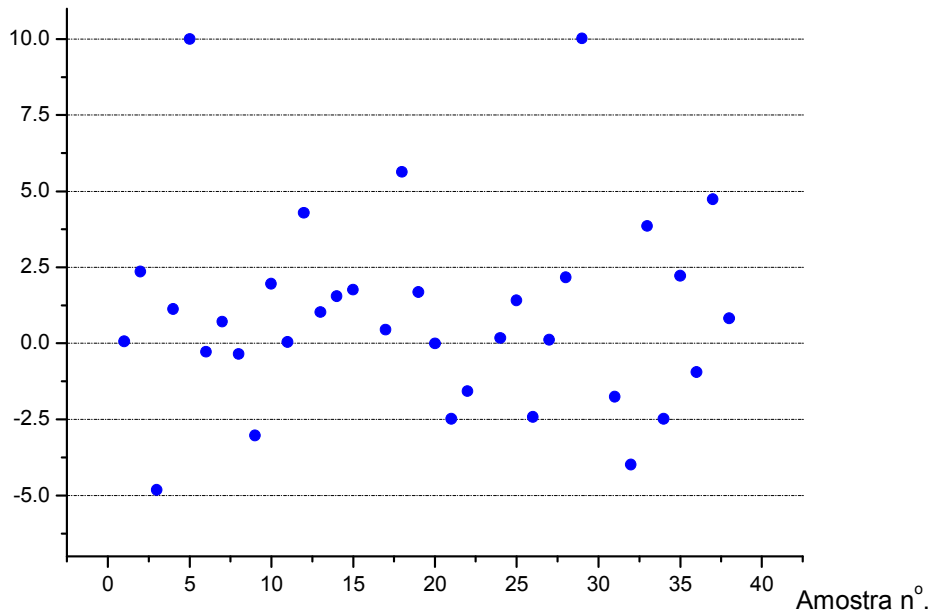


FIGURA 119 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PCR PARA T₉₀ DA CURVA DE DESTILAÇÃO

6.3.3.6 Curva de destilação: PFE

O mesmo problema de ajuste dos pontos de treinamento encontrados para modelar o T_{90} , também foram detectados para o PFE. Foi necessário utilizar 6 variáveis latentes para o PLS e 11 componentes principais para o PCR, para que a informação contida no espectro, mais o ruído inserido no final da destilação, pudesse ser modelada matematicamente.

TABELA 26 - DADOS DO CONJUNTO DE TESTE PARA PFE E MODELOS PLS E PCR.

Amostra	Nº.	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GA05	1	209,4	206,4	-3,0	-1,4	206,8	-2,6	-1,2
GC08	2	194,3	154,0	-40,3	-20,7	156,2	-38,1	-19,6
GC50	3	327,9	306,7	-21,2	-6,5	304,8	-23,1	-7,0
GA03	4	208,8	202,0	-6,8	-3,3	202,2	-6,6	-3,2
GC92	5	139,1	129,4	-9,7	-7,0	129,0	-10,1	-7,3
GC21	6	205,1	225,2	20,1	9,8	223,8	18,7	9,1
GA04	7	206,5	209,6	3,1	1,5	208,7	2,2	1,1
GC04	8	207,5	203,8	-3,7	-1,8	203,0	-4,5	-2,1
GC45	9	210,7	213,2	2,5	1,2	210,7	0,0	0,0
GC40	10	223,6	221,3	-2,3	-1,0	221,6	-2,0	-0,9
GC52	11	210,7	233,2	22,5	10,7	234,0	23,3	11,1
GC105	12	213,7	220,5	6,8	3,2	220,0	6,3	2,9
GC36	13	224,7	221,3	-3,4	-1,5	220,4	-4,3	-1,9
GC41	14	175,9	184,5	8,6	4,9	188,5	12,6	7,2
GC33	15	209,1	204,7	-4,4	-2,1	203,1	-6,0	-2,9
GC83	16	215,1	247,6	32,5	15,1	249,5	34,4	16,0
GC24	17	206,1	211,4	5,3	2,6	209,1	3,0	1,4
GC51	18	198,9	223,8	24,9	12,5	222,6	23,7	11,9
GC22	19	206,3	202,3	-4,0	-1,9	200,4	-5,9	-2,9
GA20	20	207,3	226,3	19,0	9,2	225,3	18,0	8,7
GC82	21	229,8	203,7	-26,1	-11,3	204,1	-25,7	-11,2
GC71	22	210,8	203,9	-6,9	-3,3	202,3	-8,5	-4,0
GC94	23	210,0	195,3	-14,7	-7,0	196,7	-13,3	-6,3
GC97	24	195,4	179,3	-16,1	-8,2	179,5	-15,9	-8,1
GA11	25	209,4	196,7	-12,7	-6,1	195,4	-14,0	-6,7
GC49	26	214,2	232,3	18,1	8,4	230,4	16,2	7,5
GC19	27	208,5	220,5	12,0	5,7	220,0	11,5	5,5
GC15	28	209,3	228,7	19,4	9,3	229,9	20,6	9,8
GC66	29	135,0	146,0	11,0	8,1	145,7	10,7	7,9
GC55	30	192,6	246,3	53,7	27,9	251,5	58,9	30,6
GC32	31	223,5	217,7	-5,8	-2,6	217,6	-5,9	-2,6
GC88	32	197,7	181,5	-16,2	-8,2	181,7	-16,0	-8,1
GC103	33	212,3	221,3	9,0	4,2	221,6	9,3	4,4
GC43	34	223,8	212,9	-10,9	-4,9	211,8	-12,0	-5,4
GC23	35	212,1	215,9	3,8	1,8	213,4	1,3	0,6
GC30	36	211,2	219,9	8,7	4,1	218,8	7,6	3,6
GC02	37	206,3	205,5	-0,8	-0,4	207,6	1,3	0,6
GA10	38	212,1	190,3	-21,8	-10,3	188,4	-23,7	-11,2

A tabela 26 mostra os desvios de previsão e os pontos 2 e 30 tiveram os maiores desvios de previsão. Muitos outros pontos estão fora da faixa de alta densidade de pontos de treinamento (200,0 a 220,0°C) e possuem desvios aceitáveis de previsão.

As figuras 120 e 121 mostram as dispersões dos desvios de previsão, observou-se que o modelo PCR possui capacidade preditiva equivalente ao PLS, com desvios de 10% na maioria dos pontos do conjunto de teste. Com isto pode-se aceitar que os modelos gerados poderão ser utilizados para previsão do PFE.

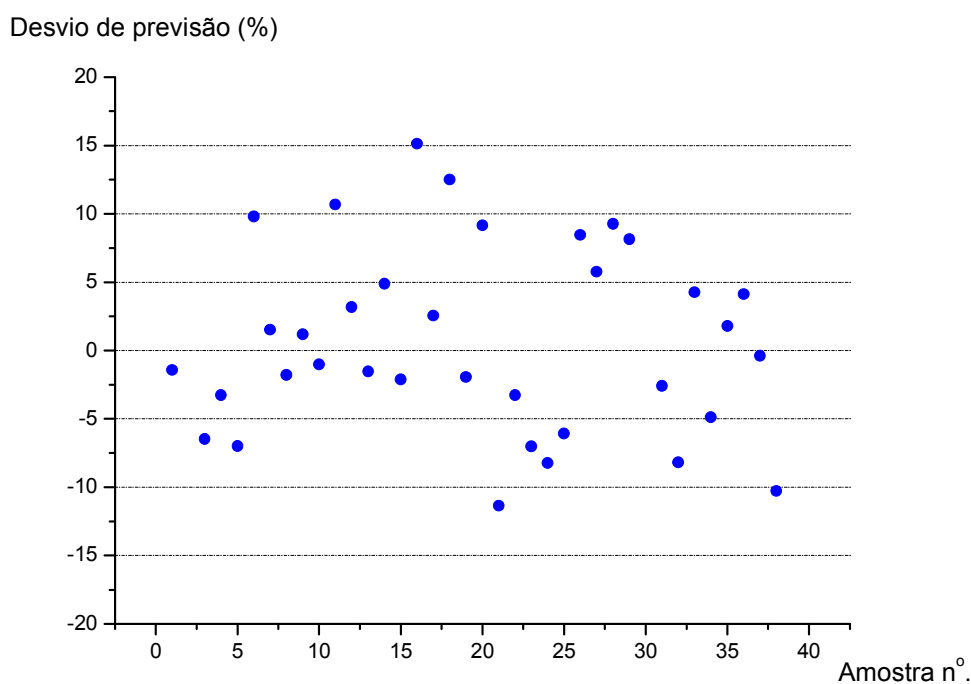


FIGURA 120 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PLS PARA PFE DA CURVA DE DESTILAÇÃO

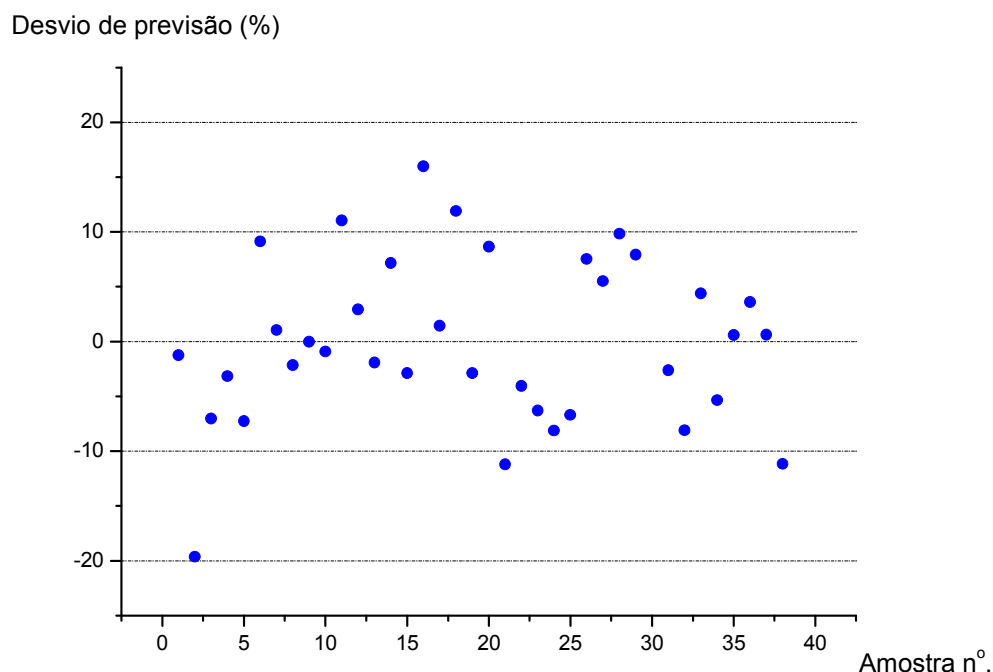


FIGURA 121 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PCR PARA PFE DA CURVA DE DESTILAÇÃO

6.3.3.7 % de Aromáticos

Apesar de existirem muitos picos no IV, que representam os aromáticos presentes na gasolina, o ajuste não ficou muito bom em ambos os modelos. O modelo PLS foi o que melhor se ajustou com 5 variáveis latentes. A faixa com alta densidade de pontos (treinamento) ficou entre 14,5 a 18,0% de aromáticos.

Alguns pontos foram descartados do treinamento para o modelo PCR para melhorar a capacidade preditiva. Observou-se o resíduo de *Student* e *leverage* com valores altos em relação aos outros, para decisão da retirada dos pontos.

Muitos pontos do teste ficaram com desvios grandes em relação à maioria, pois ficaram fora dessa faixa, conforme observado na tabela 27. Contudo, existem pontos que também estão fora da faixa e possuem pequenos desvios de previsão. Acredita-se que os pontos de teste 2, 5, 16, 29 e 30 tenham algum diferencial nos espectros de IV, complicando um pouco a previsão dos mesmos nos modelos PLS e PCR.

TABELA 27 - DADOS DO CONJUNTO DE TESTE PARA % AROMÁTICOS E MODELOS PLS E PCR.

Amostra	Nº.	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GA05	1	16,1	15,2	-0,9	-5,6	15,7	-0,4	-2,2
GC08	2	14,7	11,4	-3,3	-22,6	12,6	-2,2	-14,6
GC50	3	15,8	15,0	-0,8	-5,1	14,8	-0,9	-6,0
GA03	4	15,3	15,0	-0,2	-1,5	15,2	-0,1	-0,5
GC92	5	4,9	6,6	1,8	36,1	5,7	0,8	16,1
GC21	6	14,1	14,0	-0,1	-0,8	13,5	-0,6	-4,1
GA04	7	14,9	14,7	-0,1	-1,0	14,6	-0,2	-1,5
GC04	8	14,9	14,3	-0,5	-3,5	14,4	-0,4	-2,9
GC45	9	14,1	13,4	-0,6	-4,4	12,8	-1,2	-8,6
GC40	10	16,1	15,8	-0,3	-2,0	16,1	0,0	0,1
GC52	11	14,2	14,1	-0,1	-0,9	14,5	0,3	1,9
GC105	12	19,4	20,1	0,7	3,4	20,2	0,8	4,0
GC36	13	16,6	15,9	-0,7	-4,5	16,1	-0,5	-2,9
GC41	14	10,2	10,9	0,7	6,5	11,1	0,9	8,9
GC33	15	16,1	16,0	0,0	-0,1	15,3	-0,8	-4,9
GC83	16	13,8	17,8	4,0	29,1	18,3	4,5	32,7
GC24	17	15,5	15,0	-0,5	-3,3	15,1	-0,4	-2,4
GC51	18	14,6	14,6	0,0	0,2	14,2	-0,4	-3,1
GC22	19	15,5	15,2	-0,4	-2,3	15,3	-0,2	-1,3
GA20	20	15,2	14,8	-0,3	-2,1	15,2	0,0	0,1
GC82	21	16,2	15,7	-0,4	-2,6	14,5	-1,7	-10,5
GC71	22	14,2	14,6	0,5	3,5	14,1	0,0	-0,3
GC94	23	16,4	14,7	-1,7	-10,5	10,9	-5,5	-33,4
GC97	24	14,4	15,0	0,6	4,0	13,3	-1,2	-8,1
GA11	25	15,4	15,5	0,1	0,4	14,7	-0,7	-4,6
GC49	26	15,9	15,5	-0,4	-2,5	15,1	-0,8	-4,8
GC19	27	15,6	16,2	0,7	4,3	16,4	0,8	5,0
GC15	28	16,3	16,5	0,2	0,9	17,5	1,2	7,5
GC66	29	4,2	6,3	2,1	50,5	4,6	0,5	10,8
GC55	30	13,4	15,8	2,4	17,7	12,9	-0,5	-3,6
GC32	31	17,5	17,1	-0,3	-2,0	17,2	-0,3	-1,8
GC88	32	8,3	8,4	0,1	1,1	8,6	0,3	3,7
GC103	33	19,2	19,3	0,1	0,3	19,7	0,5	2,6
GC43	34	15,2	15,3	0,1	0,5	15,3	0,1	0,4
GC23	35	15,1	14,9	-0,1	-0,9	14,8	-0,3	-1,9
GC30	36	17,8	17,9	0,2	1,0	17,7	0,0	-0,3
GC02	37	11,9	12,1	0,2	2,0	11,5	-0,4	-3,6
GA10	38	17,0	17,5	0,5	3,0	17,0	0,0	-0,2

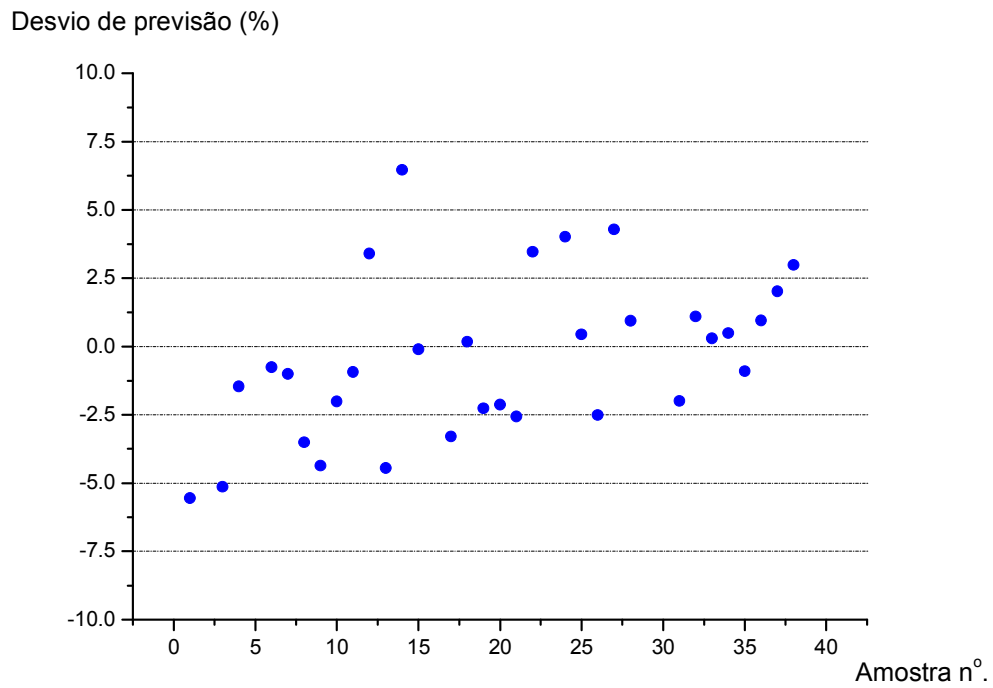


FIGURA 122 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PLS PARA TEOR DE AROMÁTICOS

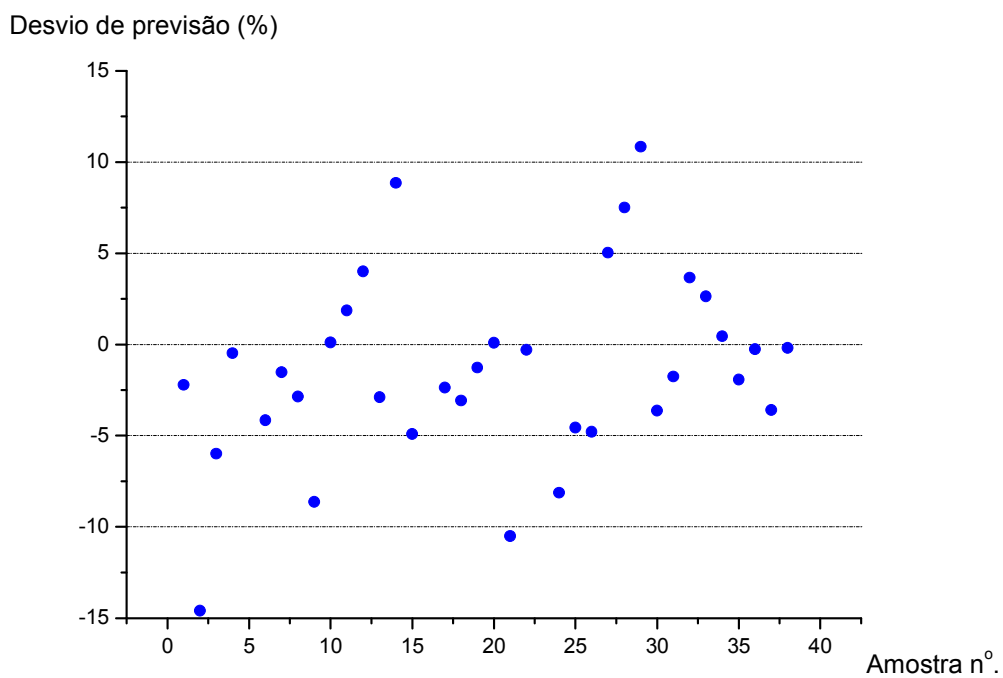


FIGURA 123 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PCR PARA TEOR DE AROMÁTICOS

As figuras 122 e 123 revelam a variação dos desvios do conjunto de teste e, por comparação direta entre os dois gráficos, observa-se que o modelo PLS possui a melhor capacidade preditiva. A maioria dos pontos ficaram abaixo de 5% de erro de previsão, o que pode ser considerado muito bom.

Após o explanado acima, pode-se dizer que o modelo PLS pode ser utilizado para prever o teor de aromáticos com boa capacidade extrapolativa, na faixa de 1 a 20%.

6.3.3.8 % Parafínicos

O ajuste para o teor de parafínicos ocorreu com 3 variáveis latentes para o modelo PLS e 5 componentes principais para o PCR, sem descarte de pontos de treinamento. Os pontos 2, 14, 16 e 30 do conjunto de teste foram os que apresentaram os maiores desvios de previsão, conforme se observa na tabela 28. Todos estão fora da faixa de maior densidade de pontos (8,0 a 13,0%), sendo que o ponto 14 apresenta o maior valor nominal do teor de parafínicos (16,97%).

TABELA 28 - DADOS DO CONJUNTO DE TESTE PARA % PARAFÍNICOS E MODELOS PLS E PCR

		CONTINUA						
Amostra	Nº.	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GA05	1	11,52	11,4	-0,1	-1,1	11,4	-0,1	-1,1
GC08	2	14,34	9,4	-4,9	-34,3	9,5	-4,8	-33,7
GC50	3	12,49	12,3	-0,2	-1,8	12,3	-0,2	-1,5
GA03	4	11,47	11,7	0,2	1,9	11,8	0,3	2,6
GC92	5	14,26	14,2	0,0	-0,1	14,2	0,0	-0,1
GC21	6	11,25	10,3	-0,9	-8,3	10,3	-0,9	-8,2
GA04	7	11,47	11,3	-0,1	-1,3	11,4	-0,1	-0,8
GC04	8	11,62	11,6	0,0	0,0	11,7	0,1	0,6
GC45	9	10,83	11,0	0,2	1,7	11,0	0,2	2,0
GC40	10	12,17	11,5	-0,7	-5,5	11,6	-0,6	-4,9
GC52	11	14,96	15,1	0,1	0,7	15,1	0,1	0,8
GC105	12	8,83	8,8	0,0	-0,2	8,7	-0,1	-1,2
GC36	13	10,97	11,1	0,2	1,6	11,2	0,2	2,1
GC41	14	16,97	13,5	-3,5	-20,7	13,6	-3,4	-20,1
GC33	15	8,75	8,5	-0,2	-2,8	8,6	-0,2	-2,2
GC83	16	12,85	10,9	-1,9	-15,0	10,9	-2,0	-15,2
GC24	17	11,67	11,4	-0,2	-1,9	11,5	-0,2	-1,6
GC51	18	12,03	11,4	-0,6	-5,0	11,5	-0,5	-4,5
GC22	19	11,95	11,9	-0,1	-0,7	11,9	0,0	-0,4
GA20	20	11,79	11,8	0,0	0,4	11,8	0,0	0,1

Amostra N°.	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	CONCLUSÃO			
					Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)	
GC82	21	13,61	13,0	-0,6	-4,4	13,0	-0,6	-4,6
GC71	22	9,03	9,5	0,4	4,8	9,4	0,4	4,5
GC94	23	16,32	14,7	-1,6	-10,1	14,6	-1,7	-10,6
GC97	24	13,03	12,9	-0,1	-1,0	12,8	-0,2	-1,8
GA11	25	8,46	8,8	0,4	4,5	8,9	0,4	4,9
GC49	26	11,62	11,7	0,1	1,1	11,8	0,2	1,3
GC19	27	12,18	11,6	-0,6	-4,9	11,6	-0,6	-5,1
GC15	28	12,92	12,3	-0,6	-5,0	12,3	-0,6	-4,6
GC66	29	14,03	13,3	-0,7	-5,1	13,4	-0,6	-4,2
GC55	30	14,99	17,3	2,3	15,2	17,3	2,3	15,4
GC32	31	9,79	9,5	-0,3	-2,6	9,5	-0,3	-3,1
GC88	32	17,82	17,1	-0,7	-3,8	17,1	-0,7	-3,9
GC103	33	9,29	9,2	-0,1	-1,5	9,1	-0,2	-2,2
GC43	34	11,99	11,8	-0,1	-1,2	11,9	-0,1	-0,6
GC23	35	11,48	11,3	-0,2	-1,9	11,3	-0,2	-1,5
GC30	36	9,43	9,7	0,3	3,1	9,7	0,2	2,5
GC02	37	8,63	9,0	0,4	4,4	9,1	0,5	5,2
GA10	38	9,33	9,5	0,2	2,0	9,5	0,2	2,1

Os modelos PLS e PCR apresentaram resultados equivalentes de previsão, de acordo com as figuras 124 e 125. Para a maioria dos pontos, os desvios ficaram abaixo de 5% para ambos os modelos.

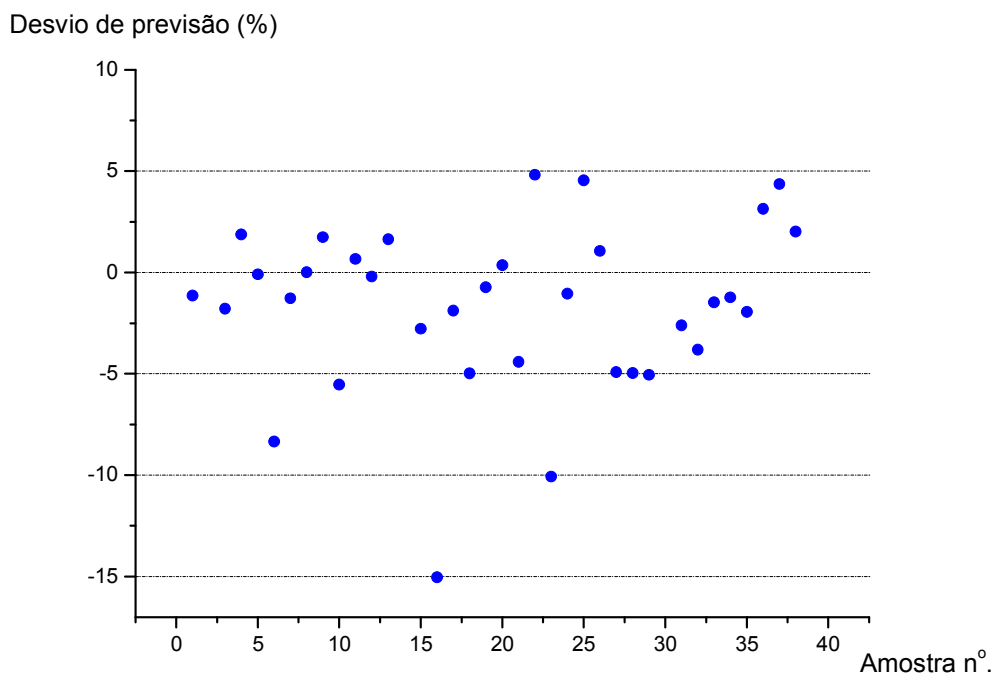


FIGURA 124 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PLS PARA TEOR DE PARAFÍNICOS

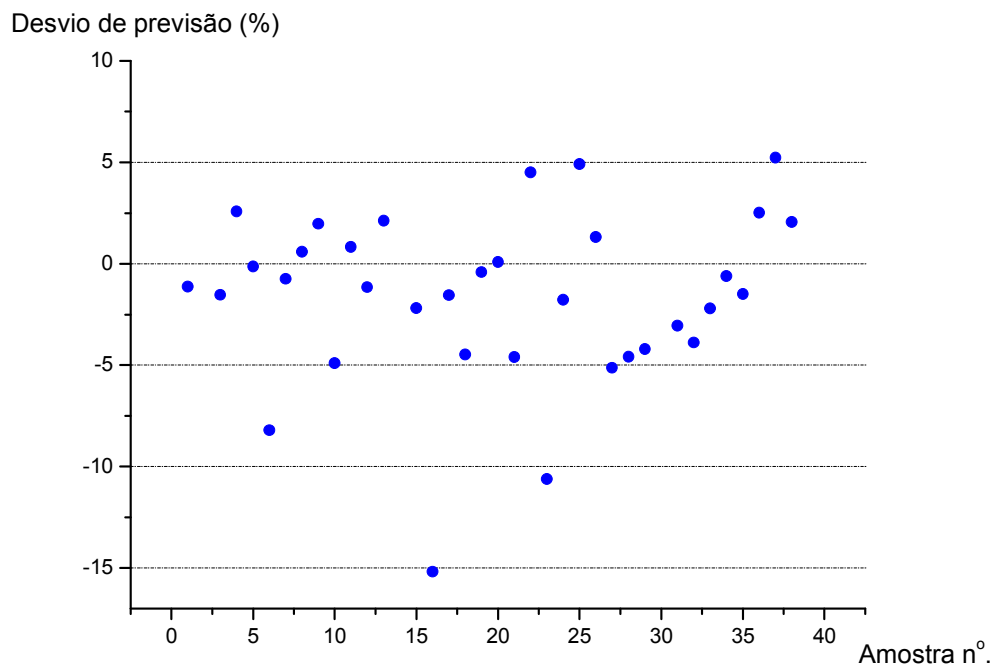


FIGURA 125 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PCR PARA TEOR DE PARAFÍNICOS

Conclui-se que os modelos PLS e PCR poderão ser utilizados para prever o teor de parafínicos na faixa de 8 a 23,5%. Contudo seria interessante adicionar amostras que possuam perfil químico diferenciado, focando-se principalmente em amostras com teores acima de 13% de parafínicos, para melhorar a robustez dos modelos obtidos.

6.3.3.9 % Isoparafínicos

Os modelos PLS e PCR obtidos para o teor de isoparafínicos utilizaram 3 e 4 variáveis de modo a se conseguir uma boa capacidade preditiva na faixa de 12,5 a 25,0%. Todos os 90 pontos do treinamento foram utilizados sem grandes problemas de ajuste. Os pontos 23 e 32 apresentaram desvios muito grandes de previsão em relação aos outros, sendo que o ponto 32 apresenta o menor teor de isoparafínicos do grupo de teste. Isto indica o problema de pouca capacidade de previsão fora da faixa densa de pontos de treinamento, que varia de 14,0 a 20%, entretanto existem outros pontos que estão na mesma faixa e possuem desvios

aceitáveis de previsão. Quanto ao ponto 23, é possível que possua imperfeições no espectro não detectados a olho nu e que interfiram na sua previsão.

TABELA 29 - DADOS DO CONJUNTO DE TESTE PARA % ISOPARAFÍNICOS E MODELOS PLS E PCR.

		CONTINUA						
Amostra	Nº.	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GA05	1	16,4	16,3	-0,1	-0,5	16,3	-0,1	-0,5
GC08	2	16,4	16,2	-0,2	-1,1	16,1	-0,2	-1,4
GC50	3	15,8	16,1	0,3	2,1	16,2	0,5	2,9
GA03	4	16,2	16,4	0,1	0,9	16,4	0,1	0,8
GC92	5	17,7	16,6	-1,1	-6,1	16,7	-0,9	-5,3
GC21	6	16,7	16,4	-0,2	-1,4	16,4	-0,3	-1,8
GA04	7	16,7	16,1	-0,6	-3,8	16,0	-0,7	-4,0
GC04	8	16,5	16,1	-0,4	-2,3	16,1	-0,4	-2,5
GC45	9	14,8	14,5	-0,3	-2,0	14,5	-0,3	-1,9
GC40	10	16,7	16,7	0,0	0,2	16,7	0,0	0,0
GC52	11	19,9	19,7	-0,1	-0,7	19,6	-0,2	-1,2
GC105	12	18,7	18,3	-0,4	-2,3	18,2	-0,4	-2,4
GC36	13	16,3	16,2	-0,2	-1,1	16,2	-0,2	-1,2
GC41	14	24,3	22,8	-1,5	-6,3	22,6	-1,7	-7,2
GC33	15	14,5	13,9	-0,6	-4,0	14,0	-0,6	-3,9
GC83	16	21,1	21,1	0,0	-0,1	21,0	-0,2	-0,7
GC24	17	16,5	16,4	-0,1	-0,8	16,4	-0,2	-1,0
GC51	18	15,5	15,5	0,0	0,2	15,5	0,0	0,3
GC22	19	16,6	17,1	0,5	3,0	17,1	0,4	2,7
GA20	20	18,2	17,9	-0,3	-1,4	17,9	-0,3	-1,5
GC82	21	19,5	18,3	-1,2	-6,1	18,3	-1,2	-6,1
GC71	22	14,0	13,3	-0,8	-5,4	13,3	-0,7	-5,0
GC94	23	16,5	18,9	2,4	14,6	19,0	2,6	15,5
GC97	24	17,6	16,9	-0,7	-4,2	17,0	-0,6	-3,6
GA11	25	14,5	14,4	-0,1	-0,8	14,4	-0,1	-1,0
GC49	26	16,2	16,3	0,1	0,8	16,4	0,2	1,0
GC19	27	16,5	16,2	-0,2	-1,5	16,2	-0,2	-1,4
GC15	28	17,3	16,6	-0,7	-4,0	16,6	-0,7	-4,0
GC66	29	18,1	17,1	-1,0	-5,3	17,2	-0,9	-4,9
GC55	30	27,0	27,5	0,5	1,9	27,3	0,3	1,1
GC32	31	15,2	14,7	-0,5	-3,5	14,7	-0,5	-3,3
GC88	32	10,4	15,4	5,0	47,5	15,7	5,3	50,8
GC103	33	18,3	18,0	-0,3	-1,6	18,0	-0,3	-1,7
GC43	34	16,4	16,7	0,3	2,0	16,8	0,4	2,3
GC23	35	16,2	17,0	0,8	4,8	16,9	0,7	4,4
GC30	36	14,9	15,7	0,8	5,2	15,7	0,8	5,1
GC02	37	12,6	13,4	0,8	6,3	13,3	0,7	5,7
GA10	38	15,4	15,1	-0,3	-2,1	15,1	-0,3	-2,0

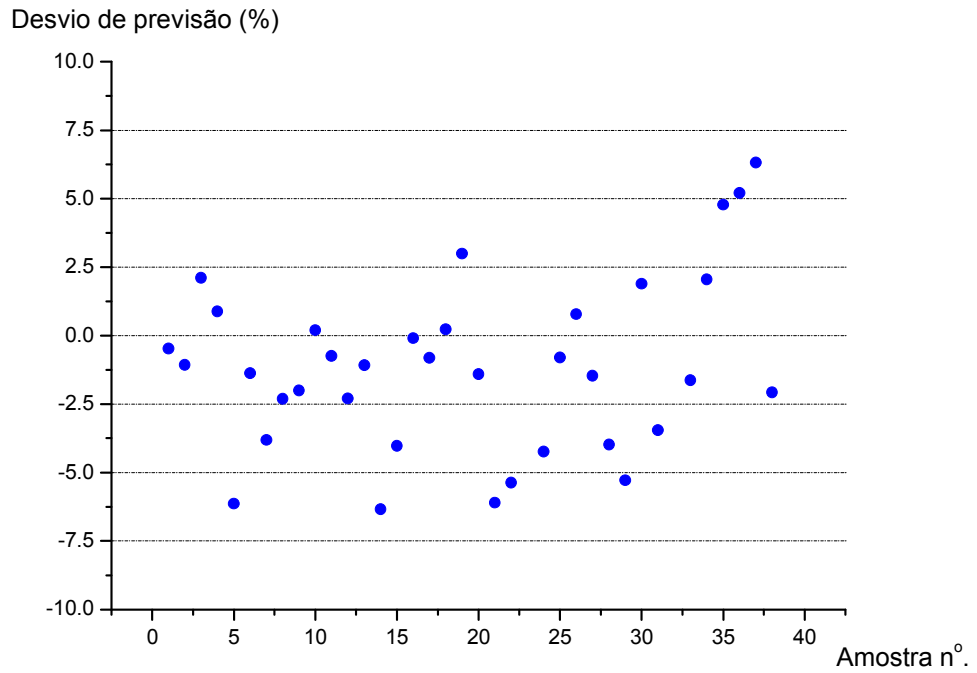


FIGURA 126 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PLS PARA TEOR DE ISOPARAFÍNICOS

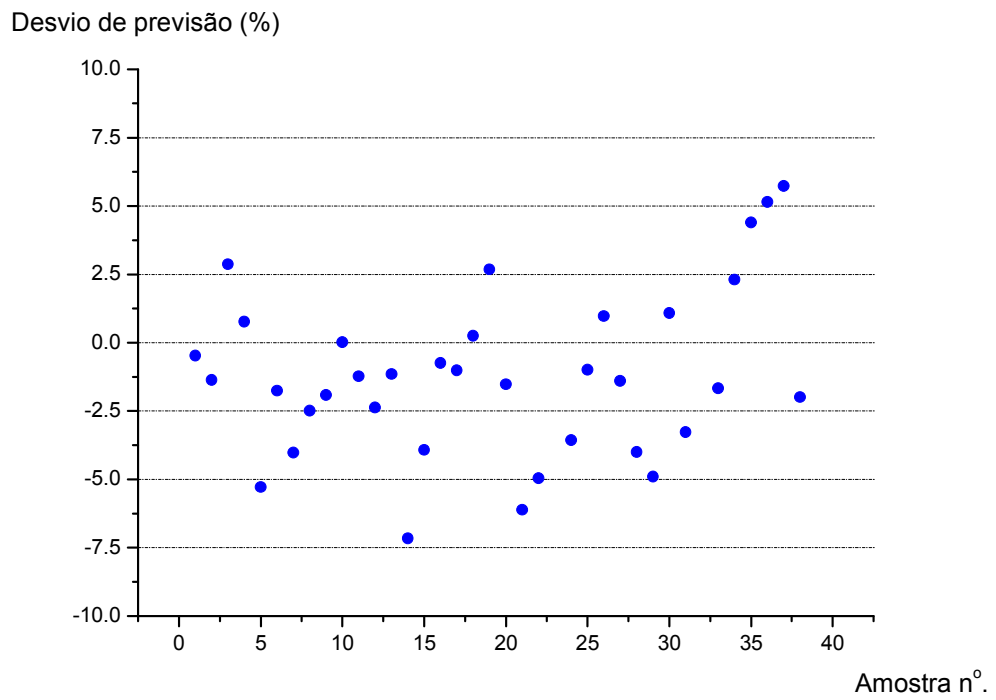


FIGURA 127 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PCR PARA TEOR DE ISOPARAFÍNICOS

Comparando-se as figuras 126 e 127, nota-se que na maioria dos pontos, os desvios ficaram abaixo de 5% para ambos os modelos. Sendo assim os modelos poderão ser utilizados para previsão do teor de isoparafínicos com boa capacidade extrapolativa.

6.3.3.10 % Naftênicos

O ajuste dos pontos de treinamento ocorreu sem grandes dificuldades, ainda que a informação analítica do espectro IV indique que os parafínicos e isoparafínicos respondam nas mesmas regiões que os naftênicos. Novamente, o modelo PLS com 3 variáveis latentes possui melhor capacidade preditiva do que o modelo PCR, com 3 componentes principais. Não houve descarte de pontos de treinamento, pois apesar dos critérios estatísticos indicarem a eliminação de diversos pontos, ao retirá-los, também ocorria diminuição do banco de dados de treino e diminuição significativa na capacidade de previsão do modelo final, como já explicado anteriormente. A tabela 30 mostra os desvios de previsão com o modelo montado com 90 amostras de gasolina.

TABELA 30 - DADOS DO CONJUNTO DE TESTE PARA % NAFTÊNICOS E MODELOS PLS E PCR.

		CONTINUA						
Amostra	Nº.	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GA05	1	14,3	14,1	-0,2	-1,5	14,3	0,0	-0,2
GC08	2	13,0	13,1	0,2	1,4	14,6	1,7	12,8
GC50	3	14,3	14,1	-0,2	-1,2	14,6	0,3	2,4
GA03	4	14,1	14,0	-0,1	-0,5	14,2	0,2	1,3
GC92	5	38,0	34,0	-4,0	-10,5	34,5	-3,5	-9,2
GC21	6	14,0	13,9	-0,1	-0,9	14,3	0,3	2,2
GA04	7	13,9	13,7	-0,2	-1,2	14,0	0,1	0,5
GC04	8	13,9	13,9	0,0	0,1	14,2	0,4	2,6
GC45	9	13,6	12,7	-0,9	-6,6	12,7	-0,9	-6,5
GC40	10	13,9	13,9	0,0	0,1	13,8	-0,1	-0,5
GC52	11	11,6	12,2	0,6	4,9	12,2	0,6	5,2
GC105	12	12,2	12,0	-0,2	-2,0	10,9	-1,3	-10,7
GC36	13	13,3	13,2	-0,1	-0,8	13,2	-0,1	-0,7
GC41	14	19,3	20,1	0,8	4,0	20,5	1,1	5,9
GC33	15	11,8	12,1	0,4	3,3	12,1	0,4	3,0
GC83	16	9,9	10,4	0,5	4,7	10,9	1,0	9,8
GC24	17	13,7	13,5	-0,2	-1,7	13,9	0,2	1,2
GC51	18	13,8	14,0	0,2	1,4	13,9	0,1	0,4

Amostra	N°.	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	CONCLUSÃO		
						Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GC22	19	13,2	13,2	0,0	0,3	13,7	0,5	4,1
GA20	20	13,8	13,8	0,0	0,1	13,9	0,1	0,7
GC82	21	13,1	14,3	1,3	9,6	14,5	1,5	11,2
GC71	22	13,1	12,7	-0,4	-3,1	12,7	-0,5	-3,7
GC94	23	23,9	23,8	-0,1	-0,5	25,1	1,2	4,9
GC97	24	21,0	20,5	-0,5	-2,3	20,5	-0,6	-2,7
GA11	25	11,5	12,0	0,5	4,8	12,0	0,5	4,5
GC49	26	15,0	14,6	-0,3	-2,2	14,3	-0,7	-4,8
GC19	27	13,3	13,2	-0,1	-0,7	13,4	0,2	1,2
GC15	28	14,1	14,2	0,2	1,2	14,4	0,4	2,6
GC66	29	38,5	37,4	-1,0	-2,7	38,1	-0,4	-1,0
GC55	30	10,4	10,4	0,1	0,8	12,2	1,8	17,6
GC32	31	12,0	12,1	0,1	0,6	12,0	0,0	-0,2
GC88	32	24,3	22,8	-1,5	-6,2	23,2	-1,1	-4,4
GC103	33	12,7	12,5	-0,2	-1,3	11,5	-1,1	-8,9
GC43	34	15,1	15,1	0,0	0,0	14,9	-0,2	-1,3
GC23	35	13,4	13,2	-0,1	-1,1	13,8	0,4	3,3
GC30	36	11,9	11,6	-0,3	-2,5	11,8	-0,1	-1,0
GC02	37	10,6	10,8	0,1	1,4	11,1	0,5	4,8
GA10	38	12,3	12,6	0,3	2,3	12,6	0,2	2,0

Desvio de previsão (%)

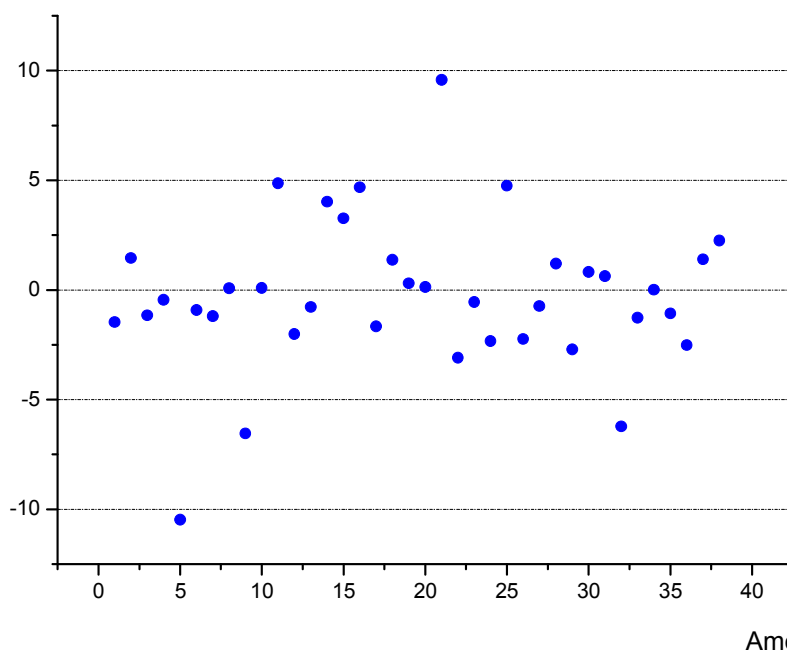


FIGURA 128 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PLS PARA TEOR DE NAFTÊNICOS

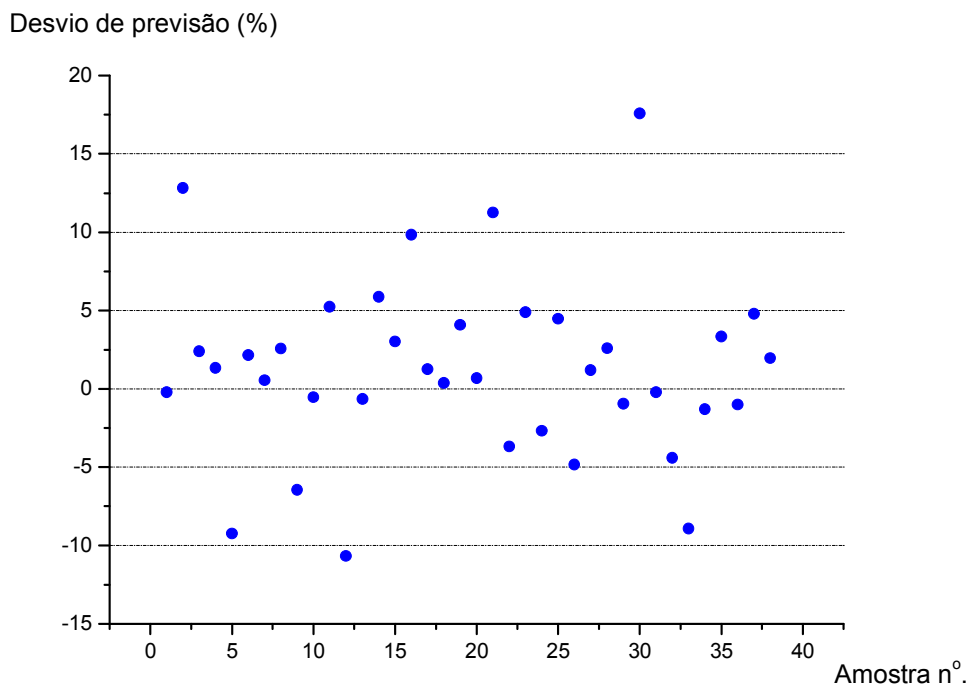


FIGURA 129 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PCR PARA TEOR DE NAFTÊNICOS

As figuras 128 e 129 mostram as dispersões dos desvios de previsão, e observou-se que o modelo PCR apresenta capacidade preditiva menor que o PLS, com desvios de 5% na maioria dos pontos do conjunto de teste. Desta forma pode-se aproveitar o modelo PLS para previsão do teor de naftênicos.

O êxito no ajuste dos espectros de IV para os teores de parafínicos, isoparafínicos e naftênicos foi uma surpresa inesperada, já que os mesmos respondem nas mesmas regiões do espectro. Poderia ocorrer interferências no sinal analítico e inserção de ruído pela variação dos teores dos três grupos. Os equipamentos portáteis GS 1000 e Irox 2000 possuem correlações matemáticas que quantificam somente a soma dos três grupos.

6.3.3.11 % Olefínicos

O ajuste dos pontos de treinamento ocorreu com 4 variáveis latentes para o PLS e 4 componentes principais. Houve necessidade de eliminação de um ponto do conjunto de treinamento para melhorar a capacidade preditiva dos modelos. Observou-se que amostras com baixos teores de olefínicos não se ajustaram muito bem no treinamento (ver apêndice B), o que gerou modelos que também não prevêem com muita precisão os baixos teores de olefínicos, como mostrados na tabela 31. Novamente o modelo PLS tem uma ligeira vantagem sobre o PCR pois, para algumas amostras cujos teores estavam baixos, foram previstos desvios menores que o PCR. Os pontos 2, 5, 29 e 30 apresentaram problemas em alguns dos modelos anteriores, sugerindo também que seus espectros estejam com maior ruído instrumental que os outros do conjunto de validação.

A dificuldade de ajuste se deve ao fato de que existe somente um pequeno pico presente no espectro IV, que represente este grupo químico sem interferências dos outros grupos. Como o pico é muito pequeno, ruído instrumental é potencializado neste caso.

TABELA 31 - DADOS DO CONJUNTO DE TESTE PARA % OLEFÍNICOS E MODELOS PLS E PCR.

		CONTINUA						
Amostra	Nº.	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GA05	1	14,6	14,9	0,3	2,0	14,9	0,3	1,9
GC08	2	12,6	17,8	5,2	41,6	17,3	4,7	37,6
GC50	3	14,4	13,0	-1,4	-9,5	12,9	-1,5	-10,1
GA03	4	14,8	15,5	0,7	4,7	15,6	0,8	5,3
GC92	5	1,4	2,0	0,6	40,6	1,2	-0,2	-17,1
GC21	6	12,2	11,2	-0,9	-7,5	11,3	-0,8	-6,9
GA04	7	14,4	15,1	0,6	4,3	15,1	0,6	4,3
GC04	8	14,4	14,5	0,1	0,7	14,6	0,2	1,3
GC45	9	13,5	12,7	-0,7	-5,5	12,4	-1,1	-8,0
GC40	10	14,8	16,3	1,5	10,2	16,6	1,8	11,9
GC52	11	13,1	11,7	-1,3	-10,3	12,1	-1,0	-7,4
GC105	12	17,3	17,1	-0,2	-1,3	16,9	-0,4	-2,6
GC36	13	16,0	16,5	0,6	3,7	16,6	0,6	4,0
GC41	14	3,2	3,6	0,4	14,2	5,5	2,4	75,4
GC33	15	16,9	15,5	-1,4	-8,4	15,3	-1,6	-9,5
GC83	16	18,1	14,5	-3,6	-19,8	14,6	-3,4	-19,0
GC24	17	15,3	15,5	0,2	1,4	15,5	0,2	1,6
GC51	18	13,4	13,9	0,5	4,1	13,9	0,5	3,9
GC22	19	15,1	15,3	0,2	1,2	15,3	0,2	1,3
GA20	20	11,8	13,4	1,6	13,8	13,2	1,4	12,3

Amostra N°.	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	CONCLUSÃO			
					Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)	
GC82	21	9,0	9,2	0,3	3,0	9,7	0,8	8,7
GC71	22	13,9	13,6	-0,3	-2,1	13,1	-0,8	-5,8
GC94	23	2,9	3,0	0,1	2,2	2,7	-0,2	-7,6
GC97	24	7,6	7,7	0,1	1,3	7,4	-0,3	-3,4
GA11	25	16,5	15,2	-1,4	-8,2	14,8	-1,8	-10,6
GC49	26	13,0	13,7	0,7	5,8	13,8	0,9	6,6
GC19	27	16,2	15,3	-0,9	-5,4	15,0	-1,1	-7,1
GC15	28	16,8	17,0	0,2	1,1	17,5	0,7	4,2
GC66	29	0,9	-0,1	-0,9	-110,4	0,5	-0,4	-44,5
GC55	30	7,2	4,2	-3,0	-41,4	5,1	-2,1	-29,5
GC32	31	18,3	16,9	-1,4	-7,7	16,2	-2,1	-11,6
GC88	32	1,0	1,1	0,2	16,0	1,9	0,9	95,9
GC103	33	16,8	16,8	0,1	0,5	16,7	0,0	-0,2
GC43	34	14,2	13,7	-0,4	-3,0	14,3	0,1	0,9
GC23	35	14,9	14,8	-0,1	-0,6	14,9	0,0	-0,3
GC30	36	18,1	17,5	-0,6	-3,4	16,7	-1,3	-7,5
GC02	37	12,0	11,7	-0,2	-1,9	11,8	-0,2	-1,5
GA10	38	18,2	16,1	-2,1	-11,6	15,9	-2,3	-12,9

Desvio de previsão (%)

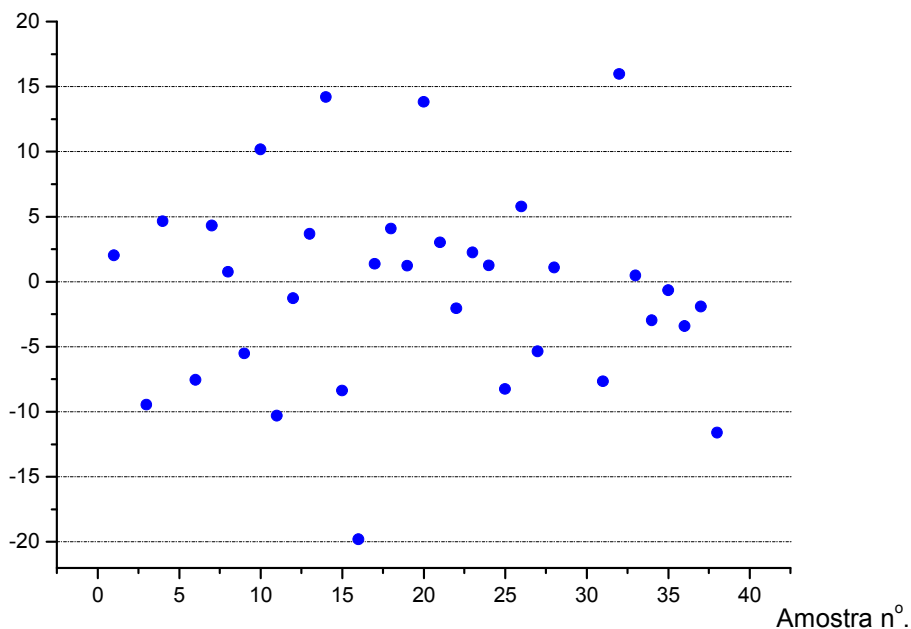


FIGURA 130 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PLS PARA TEOR DE OLEFÍNICOS

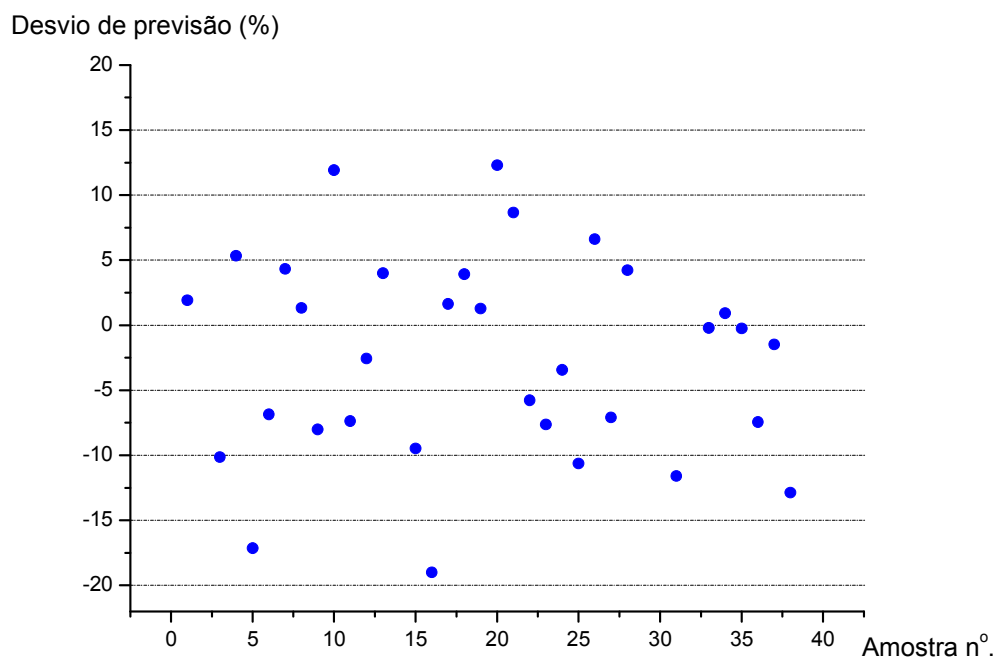


FIGURA 131 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PCR PARA TEOR DE OLEFÍNICOS

Os desvios das amostras de teste apresentados nas figuras 130 e 131 estão, na sua maioria, abaixo de 10%. Mesmo assim, esta porcentagem é considerada pequena e, sendo assim, o modelo PLS, por ser mais robusto que o PCR, poderá ser utilizado para prever o teor de olefínicos.

6.3.3.12 % Oxigenados

O ajuste de pontos do conjunto de treinamento ocorreu sem descarte de pontos, com 3 variáveis latentes para o PLS e 3 componentes principais para o PCR. Em relação aos outros modelos obtidos até o momento para a composição química, o teor de oxigenados foi o que melhor apresentou capacidade preditiva em uma ampla faixa de concentração (17,0 a 47%). Todos os pontos do conjunto de teste tiveram desvios de previsão aceitáveis (ver tabela 32) e a faixa de maior concentração de pontos variou de 24,0 a 31,0% de oxigenados.

O bom ajuste pode ser justificado devido à presença de bandas não coincidentes com outros grupos químicos, representando o álcool etílico no espectro IV, em 1051 e 1090 cm^{-1} referentes às deformações da molécula do C-O,

e em 3339 cm^{-1} devido à deformação da molécula do O-H. Estas bandas são bastante largas, com grande intensidade de sinal e em regiões onde não ocorrem interferências dos outros grupos químicos. Isto sugere que um refinamento das regiões do espectro IV pode ser realizado, de modo que se possa retirar interferências e melhorar ainda mais a capacidade preditiva dos outros modelos, para os outros grupos químicos da gasolina.

TABELA 32 - DADOS DO CONJUNTO DE TESTE PARA % OXIGENADOS E MODELOS PLS E PCR.

Amostra	Nº.	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GA05	1	24,4	24,5	0,1	0,3	24,6	0,2	0,6
GC08	2	24,8	24,4	-0,4	-1,5	24,9	0,1	0,4
GC50	3	23,5	24,4	0,8	3,6	24,0	0,5	2,2
GA03	4	24,7	24,7	0,0	-0,1	25,0	0,3	1,3
GC92	5	23,5	24,6	1,1	4,8	24,6	1,1	4,6
GC21	6	29,5	30,7	1,1	3,8	30,9	1,4	4,6
GA04	7	26,1	26,2	0,1	0,4	26,6	0,5	1,8
GC04	8	25,9	26,5	0,5	2,0	26,8	0,9	3,3
GC45	9	30,7	33,0	2,3	7,6	33,2	2,5	8,2
GC40	10	23,9	23,6	-0,3	-1,4	23,7	-0,3	-1,1
GC52	11	24,1	26,9	2,8	11,4	26,7	2,6	10,8
GC105	12	19,4	18,7	-0,6	-3,3	18,5	-0,9	-4,5
GC36	13	24,2	24,6	0,3	1,4	24,6	0,3	1,3
GC41	14	24,7	26,6	1,9	7,9	26,5	1,9	7,5
GC33	15	29,2	30,1	0,9	3,0	30,3	1,0	3,5
GC83	16	20,5	22,2	1,7	8,3	21,6	1,1	5,3
GC24	17	24,7	25,7	1,0	4,0	25,9	1,1	4,6
GC51	18	28,1	28,1	-0,1	-0,3	28,2	0,1	0,2
GC22	19	24,9	24,5	-0,4	-1,5	24,9	0,0	-0,2
GA20	20	25,2	25,0	-0,2	-0,9	24,6	-0,6	-2,3
GC82	21	25,3	26,9	1,6	6,3	26,4	1,1	4,4
GC71	22	31,3	32,3	1,0	3,2	32,0	0,7	2,2
GC94	23	20,4	21,5	1,1	5,4	21,2	0,8	4,0
GC97	24	23,8	25,2	1,4	6,0	24,8	1,0	4,3
GA11	25	31,0	31,0	0,0	0,1	31,3	0,3	1,0
GC49	26	25,8	25,0	-0,7	-2,9	25,1	-0,6	-2,5
GC19	27	23,8	23,6	-0,2	-0,9	23,6	-0,2	-0,9
GC15	28	19,9	20,6	0,8	3,8	20,5	0,6	3,1
GC66	29	23,0	21,9	-1,1	-4,9	22,3	-0,7	-3,1
GC55	30	24,3	23,4	-0,9	-3,7	23,4	-1,0	-3,9
GC32	31	24,2	25,3	1,1	4,6	25,3	1,1	4,7
GC88	32	32,9	31,8	-1,1	-3,4	30,8	-2,1	-6,3
GC103	33	19,2	19,7	0,5	2,6	19,3	0,1	0,5
GC43	34	23,4	24,2	0,8	3,2	24,3	0,8	3,6
GC23	35	26,3	26,3	0,0	0,1	26,6	0,3	1,3
GC30	36	24,8	24,0	-0,8	-3,2	24,0	-0,7	-3,0
GC02	37	42,0	40,7	-1,3	-3,0	41,2	-0,8	-1,8
GA10	38	24,5	25,5	1,0	4,1	25,6	1,1	4,4

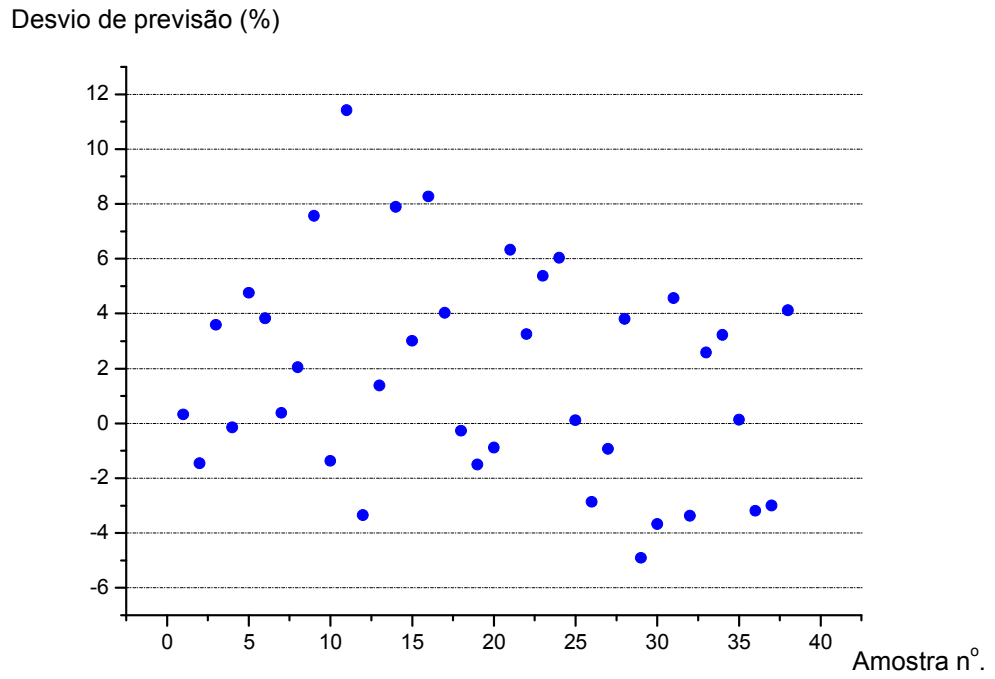


FIGURA 132 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PLS PARA TEOR DE OXIGENADOS

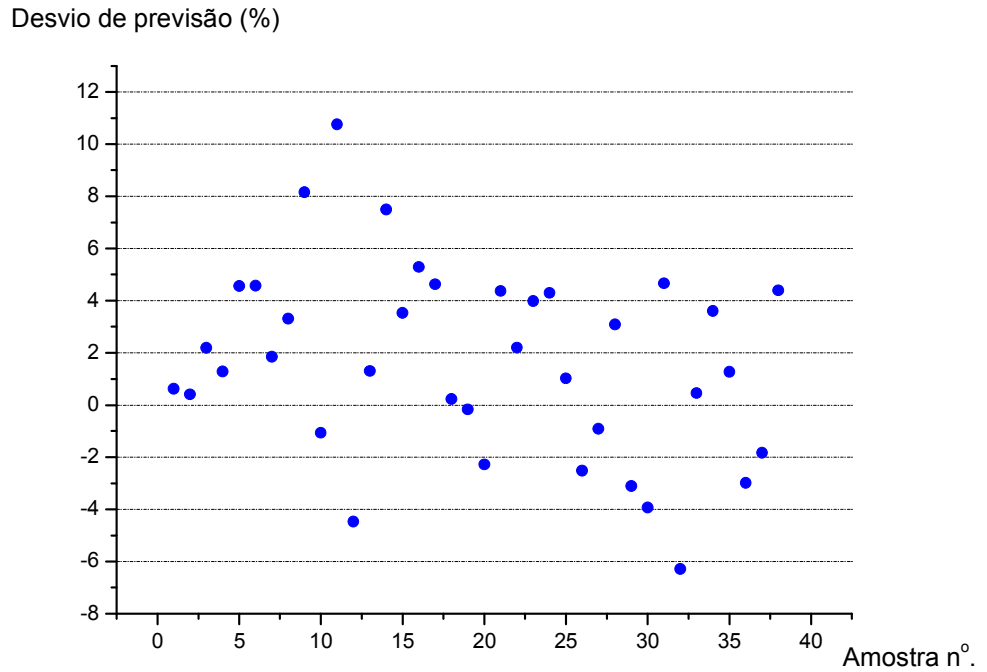


FIGURA 133 – GRÁFICO DOS DESVIOS DE PREVISÃO DO MODELO PCR PARA TEOR DE OXIGENADOS

Ambos os modelos obtidos possuem os mesmos desvios de previsão, conforme mostrado nas figuras 132 e 133, e poderão ser utilizados para previsão do teor de oxigenados com desvios aceitáveis.

Resumindo a parte da modelagem matemática, todas as propriedades físico-químicas e a composição química obtiveram ajuste com as 90 amostras de gasolina do conjunto de treinamento, sendo que em alguns deles houve necessidade de retirada de pontos para melhorar a capacidade preditiva dos modelos. O ajuste ocorreu porque os equipamentos utilizados neste estudo estavam calibrados e o pré-tratamento dos espectros de IV ajudou a minimizar o ruído instrumental do equipamento de infravermelho. A tabela 33 apresenta o resumo com informações importantes de cada modelo obtido, enquanto que os modelos detalhados estão apresentados no apêndice B. Os modelos PLS tiveram capacidade preditiva igual ou superior e, utilizaram menor número de variáveis latentes, do que os modelos PCR.

Os modelos PLS poderão ser colocados em um equipamento de infravermelho portátil, que execute a leitura do espectro no intervalo de 740,0 a 3800,0 cm^{-1} , e que possua um sensor de fibra ótica com ATR. Os modelos poderão fazer parte de um banco de dados interno, no qual poderá ser inserido mais amostras diferenciadas para melhorar a robustez dos mesmos. Leituras de novas amostras poderão ser realizadas *in situ*, já que o equipamento poderá ser transportado facilmente para estudos em campo, desde que seja desenvolvido um sistema de segurança para transporte.

Em comparação com os equipamentos GS 1000 e IROX 2000, o intervalo de leitura é maior e, conseqüentemente, fornece maior quantidade de informação analítica, que é aproveitada nos modelos matemáticos. O sensor ATR possui capacidade de obter melhores sinais, mesmo que ocorra presença em excesso de um dos grupos químicos, já que o sinal é atenuado. Além disso, existe a facilidade de amostragem, a qual basta inserir o sensor no tanque, garrafa, etc. para executar a leitura. O que acontece nos equipamentos existentes é que quando ocorre saturação do sinal analítico, a amostra deverá ser diluída tantas vezes até que se consiga obter um espectro para previsão das propriedades. Estes equipamentos

são portáteis, porém não devem ser transportados, pois são facilmente danificados. Além disso, os equipamentos comerciais não prevêm de maneira diferenciada os teores de parafínicos, isoparafínicos e naftênicos, conforme foi obtido neste trabalho.

Utilizou-se as tabelas 33 e 34, que contêm todas as informações úteis e resumidas para comparação deste trabalho com outros trabalhos desenvolvidos na área. Cita-se por exemplo o trabalho de ROCHA DA LUZ (2003), no qual a autora utilizou 77 amostras de gasolina para treinamento e 33 para validação, utilizando-se os espectros de infravermelho médio com ATR e seleção de faixas do espectro para cada propriedade estudada. Por exemplo, para o T_{50} utilizou a faixa de 700 a 1200 cm^{-1} e 1340 a 1700 cm^{-1} para montagem do modelo PLS. Parece que esta seleção de faixas de espectro ajudou, pois os resultados ficaram na maioria abaixo dos resultados obtidos neste estudo, conforme mostrado na tabela 35. Não está muito claro quais pré-tratamentos foram utilizados, número de variáveis latentes e tampouco o período total de coleta das amostras. São importantes parâmetros para comparação já que, para nosso trabalho, o longo período de coleta inseriu bastante ruído nos espectros de IV e o número de variáveis latentes ajuda a identificar se houve muita variação no conjunto de treinamento. Comparou-se também os resultados da composição química, mas nenhum trabalho utilizou cromatografia gasosa para identificação dos grupos químicos. Todos os encontrados até o momento utilizaram o equipamento portátil IROX 2000 para obtenção dos valores de referência. Vale a pena salientar que os resultados de composição obtidos por IROX 2000 dependem muito de seu banco de dados e podem fornecer resultados com grandes desvios, conforme a faixa de previsão empregada.

Os resultados obtidos também podem ser comparados ao trabalho anterior de mestrado (CÔCCO, 2003 e CÔCCO; YAMAMOTO; VON MEIEN, 2005), no qual encontrou-se desvios menores de previsão para curva de destilação, densidade e pressão de vapor Reid. As diferenças principais que podem explicar os desvios são: conjunto menor de amostras para treino e teste (25 para treino, 10 para teste), ferramenta para regressão diferente (RNA), previsão de propriedades a partir de composição química obtida por cromatografia gasosa e principalmente, curto período de coleta de amostras. De qualquer maneira, os resultados estão condizentes em ambos os estudos, pois as maiores dificuldades para a modelagem foram em T_{90} e PFE e também com PV Reid. Observa-se na tabela 33 que houve

necessidade de um maior número de variáveis latentes ou componentes principais para modelar o ponto final e o T_{10} da curva de destilação, comparadas às outras propriedades. Na tabela 34 observa-se também que a média dos desvios de previsão também são maiores para as propriedades de PV Reid (3,9%), T_{90} (3,6%) e ponto final de destilação (6,6%), indicando a dificuldade de previsão pelos modelos obtidos. Essa maior variação é considerada normal comparada às outras propriedades, cuja detecção é mais complexa e sujeita a interferências aleatórias. Observa-se também, que a média dos desvios de previsão para o teor de aromáticos (7,1%) e olefínicos (11,6%) é maior, comparada aos teores dos outros grupos químicos. Nota-se que o próprio erro inserido pelo espectro infravermelho (coluna 4 da tabela 34) já é alto, devido a variações aleatórias provenientes de ruído espectral. Esses erros aleatórios contribuíram para aumentar os valores dos desvios de previsão da composição química.

TABELA 33 – RESUMO DOS PARÂMETROS DE TODOS OS MODELOS OBTIDOS NESTE ESTUDO

Propriedade físico-química ou composição da gasolina	Número de VL	Número de PC	Número de pontos para treinamento PLS / PCR	Número de pontos para teste PLS / PCR	Faixa de utilização e maior densidade de pontos (PLS)	RMSEC PLS/PCR	RMSECV PLS/PCR	RMSEP PLS/PCR
Massa específica	3	4	90/ 90	38/38	752,0 - 764,0 738,0 - 768,0	0,36 / 0,38	3,94 / 3,90	3,50 / 3,48
Pressão de vapor Reid	4	4	77/76	29/29	17,0 - 65,0 50,0 - 55,0	0,65 / 1,31	3,04 / 2,82	2,81 / 2,61
Curva de destilação: T ₁₀	6	7	88/90	38/38	50,0 - 76,0 54,0 - 60,0	0,17 / 0,66	2,75 / 2,36	2,18 / 2,03
Curva de destilação: T ₅₀	2	4	90/90	38/38	65,0 - 76,0 72,0 - 74,0	0,11 / 0,12	1,36 / 1,38	1,02 / 1,02
Curva de destilação: T ₉₀	5	9	89/88	38/38	100,0 - 195,0 160,0 - 180,0	1,59 / 3,72	10,44 / 9,89	9,85 / 9,73
Curva de destilação: T _{PFE}	6	11	90/90	38/38	160,0 - 320,0 200,0 - 220,0	2,86 / 3,38	21,11/ 22,02	17,53/ 18,01
% aromáticos	5	4	90/87	38/38	1,0 - 20,0 14,5 - 18,0	0,25 / 0,58	1,02 / 0,85	1,14 / 1,369
% parafínicos	3	5	90/90	38/38	8,0 - 23,5 8,0 -13,0	0,21 / 0,21	1,13 / 1,13	1,18 / 1,17
% isoparafínicos	3	4	90/90	38/38	12,5 - 25,0 14,0 - 20,0	0,14 / 0,20	1,48 / 1,42	1,06 / 1,11
% naftênicos	3	3	90/90	38/38	10,0 - 48,0 10,0 - 16,0	0,31 / 0,69	1,08 / 1,14	0,80 / 0,92
% olefínicos	4	4	89/89	38/38	0,5 - 20,0 12,0 - 18,0	0,36 / 0,56	1,26 / 1,26	1,40 / 1,44
% oxigenados	3	3	90/90	38/38	17,0 - 47,0 24,0 - 31,0	0,42 / 0,65	1,66 / 1,61	1,06 / 1,03

TABELA 34 – RESUMO DOS DESVIOS DO CONJUNTO DE TESTE

Propriedade	Repetitividade Infravermelho (%)	Reprodutibilidade Equipamento, máx. (%)	Desvio total (IV + EQ)	Média dos desvios de previsão
Massa específica	0,02	0,05	0,1	1,6
Pressão de vapor Reid	1,24	0,33	1,3	3,9
Curva de destilação: T ₁₀	2,22	1,37	2,6	2,8
Curva de destilação: T ₅₀	0,21	0,42	0,5	0,9
Curva de destilação: T ₉₀	0,43	1,6	1,7	3,6
Curva de destilação: T _{PFE}	0,54	0,85	1,0	6,6
% aromáticos	0,58	1,0	1,2	7,1
% parafínicos	2,42	1,0	2,6	4,8
% isoparafínicos	3,26	1,0	3,4	4,4
% naftênicos	1,51	1,0	1,8	2,4
% olefínicos	7,02	1,0	7,1	11,6
% oxigenados	0,66	1,0	1,2	3,3

Outro trabalho interessante para comparação foi o desenvolvido por SACORAGUE, 2004, que utilizou regiões diferenciadas do espectro NIR para fazer previsões de algumas propriedades físico-químicas e composição química obtida por IROX 2000. O autor utilizou um grande número de amostras para treino (318) e teste (159) e primeira derivada como pré-tratamento. O autor não conseguiu bons resultados de previsão para PV Reid e explicou que as amostras perderam voláteis durante o manuseio. No geral os desvios ficaram menores, porém as faixas de trabalho de cada propriedade, também foram bem menores que as faixas apresentadas neste estudo. Os modelos de treinamento apresentaram baixos coeficientes de correlação (máximo 0,92 para T₁₀), exceto para a massa específica

(0,9869) e observou-se aglomerados de pontos em pequenas regiões nos gráficos de propriedades previstas *versus* calculadas, indicando que o ajuste dos dados de treinamento não foram tão bons. Deve-se salientar que, no presente trabalho, objetivou-se abranger o máximo de variabilidade nas propriedades físico-químicas, e a aglomeração de pontos é pequena em relação ao trabalho de SACORAGUE.

TABELA 35 – COMPARAÇÃO DESTE TRABALHO COM OUTRAS DISSERTAÇÕES E TESES.
CONTINUA

Propriedade	Tipo de Infravermelho	Parâmetro deste estudo	Parâmetro da referência	Referência
Massa específica	MID - ATR	3,50 (RMSEP)	0,0023 (RMSEP)	ROCHA DA LUZ, 2003.
Curva de destilação: T ₁₀		2,18 (RMSEP)	0,89 (RMSEP)	
Curva de destilação: T ₅₀		1,02 (RMSEP)	0,39 (RMSEP)	
Curva de destilação: T ₉₀		9,85 (RMSEP)	2,50 (RMSEP)	
Curva de destilação: T _{PFE}		17,53 (RMSEP)	3,02 (RMSEP)	
% aromáticos		1,14 (RMSEP)	0,92 (RMSEP)	
% olefínicos		1,40 (RMSEP)	2,36 (RMSEP)	
% oxigenados		1,06 (RMSEP)	1,35 (RMSEP)	
Massa específica		1,6 (média de desvios)	0,1 (média de desvios)	CÔCCO, 2003
PV Reid		3,9 (média de desvios)	2,6 (média de desvios)	
Curva de destilação: T ₁₀		2,8 (média de desvios)	0,9 (média de desvios)	
Curva de destilação: T ₅₀		0,9 (média de desvios)	0,3 (média de desvios)	
Curva de destilação: T ₉₀		3,6 (média de desvios)	1,7 (média de desvios)	
Curva de destilação: T _{PFE}		6,6 (média de desvios)	1,6 (média de desvios)	
Massa específica	NIR	3,50 (RMSEP)	0,0006 (RMSEP)	SACORAGUE, 2004

CONCLUSÃO

Propriedade	Tipo de Infravermelho	Parâmetro deste estudo	Parâmetro da referência	Referência
Curva de destilação: T ₁₀		2,18 (RMSEP)	0,89 (RMSEP)	SACORAGUE, 2004
Curva de destilação: T ₅₀		1,02 (RMSEP)	0,70 (RMSEP)	
Curva de destilação: T ₉₀		9,85 (RMSEP)	2,50 (RMSEP)	
Curva de destilação: T _{PFE}		17,53 (RMSEP)	5,90 (RMSEP)	
% aromáticos		1,14 (RMSEP)	0,89 (RMSEP)	
% olefínicos		1,40 (RMSEP)	2,81 (RMSEP)	
% oxigenados		1,06 (RMSEP)	0,56 (RMSEP)	
Massa específica	NIR	3,50 (RMSEP)	0,0026 (RMSEP)	CRUZ, 2003
Curva de destilação: T ₁₀		2,18 (RMSEP)	0,85 (RMSEP)	
Curva de destilação: T ₅₀		1,02 (RMSEP)	0,68 (RMSEP)	
Curva de destilação: T ₉₀		9,85 (RMSEP)	3,10 (RMSEP)	
Curva de destilação: T _{PFE}		17,53 (RMSEP)	4,24 (RMSEP)	
% aromáticos		1,14 (RMSEP)	0,69 (RMSEP)	
% olefínicos		1,40 (RMSEP)	2,06 (RMSEP)	
% oxigenados		1,06 (RMSEP)	0,57 (RMSEP)	

O estudo desenvolvido por CRUZ, 2003 utilizou Raman para prever as mesmas propriedades e escolheu regiões específicas para cada variável estudada. O número de amostras estudadas foram 48 para treinamento e 20 para teste. Os coeficientes de correlação dos modelos ficaram no máximo em 0,96 para aromáticos (valores de referência por IROX 2000) e, para os outros, no máximo 0,87 (massa específica), indicando que o ajuste não foi muito bom. Também houve variação nos pontos de previsão, visualizados a partir dos gráficos de propriedades

previstas *versus* calculadas. De qualquer maneira os desvios RMSEP ficaram próximos, com dificuldades de previsão no PFE e T_{90} , exceto para a massa específica.

7 CONCLUSÕES

Os parafínicos, isoparafínicos e naftênicos estão representados por 6 bandas (em 729, 1377, 1454, 2872, 2926 e 2957 cm^{-1}) no espectro infravermelho da gasolina. Os aromáticos estão representados por 5 bandas, das quais 3 são não coincidentes com outros grupos químicos: 694, 1495 e 1607 cm^{-1} . As outras bandas estão localizadas em 729 e 1454 cm^{-1} , e suas deformações ocorrem no mesmo nível energético que os outros grupos. O etanol está representado em 8 bandas do espectro. As bandas em 729, 1377, 1454, 2872, 2926 e 2957 cm^{-1} respondem no mesmo nível de energia que os outros grupos. Porém, em 1051, 1090 e 3339 cm^{-1} , as bandas são exclusivas (não coincidentes com outros grupos), referentes às deformações das moléculas C-O e O-H. Conclui-se portanto, que o espectro na região de infravermelho médio contém informações que representam todos os grupos químicos existentes na gasolina.

A melhor técnica de amostragem utilizada para a obtenção dos espectros IV foi por ATR (reflexão total atenuada) em célula de seleneto de zinco, que forneceu informações importantes para a montagem de correlações matemáticas. Esta técnica permitiu uma atenuação do sinal analítico, de modo que nenhuma banda presente no espectro infravermelho apresentou saturação de sinal.

Na técnica de ionização química com líquidos, grupos saturados como os parafínicos, isoparafínicos e naftênicos apresentaram fragmentos do tipo $[M-1]^+$, enquanto que, para os compostos insaturados como os aromáticos e olefínicos, os fragmentos gerados foram do tipo $[M+1]^+$. Esta técnica serviu para auxiliar a identificação de grupos que apresentaram o mesmo espectro de massas por impacto de elétrons. Por exemplo, a ionização química permitiu diferenciar os olefínicos dos naftênicos pela formação dos fragmentos $[M+1]^+$ e $[M-1]^+$ respectivamente.

A avaliação dos espectros de massas por impacto de elétrons, permitiu identificar 290 compostos da gasolina, seguindo uma seqüência de eluição cromatográfica apresentadas em normas ASTM e na biblioteca PIANO. Para que se tenha certeza da identificação destes compostos, seria necessário realizar ensaios de RMN ou infravermelho para cada um deles em separado, o que é considerado inviável, por isso realizou-se a identificação fundamentada em normas internacionais. Os grupos químicos mais fáceis de serem identificados foram os aromáticos e os parafínicos. Os espectros de massas dos naftênicos e olefínicos

podem ser facilmente confundidos entre si, já que os espectros são idênticos. Os espectros de massas dos isoparafínicos também são complexos, devido à ausência do íon molecular.

Após a identificação, adicionou-se cerca de 100 compostos desconhecidos na biblioteca PIANO (somente a função química e o número de carbonos). Com isto, o programa DHA quantificou os principais grupos químicos das amostras, reduzindo-se o teor de desconhecidos de 8% para 2 a 3% (v/v) em média. Sendo assim, a identificação detalhada da gasolina proporcionou uma redução significativa no teor de desconhecidos, contribuindo com a melhora da informação contida no banco de dados de composição química das amostras de gasolina.

A técnica de regressão de dados PLS alcançou os melhores ajustes de treinamento para todas as propriedades. Sendo assim, obteve-se modelos matemáticos capazes de identificar com rapidez uma composição química média a partir de espectros no IV, além de prever com pequenos desvios as propriedades de interesse da gasolina. De um modo geral obteve-se modelos matemáticos com bons ajustes de treinamento, com coeficientes de correlação maiores que 0,975 (T_{10}) atingindo um máximo de 0,998 (teor de naftênicos). A capacidade preditiva de alguns modelos matemáticos, como pressão de vapor Reid, T_{50} , T_{90} , PFE, teor de aromáticos e naftênicos, ficaram restritas a faixas menores do que as faixas de treinamento. Sugere-se que novas coletas de amostra se realizem para melhorar a capacidade preditiva destes modelos.

Diversos pré-tratamentos aplicados foram úteis na redução do ruído e um equipamento portátil poderá ser construído, utilizando-se todo o banco de dados gerado. Deve-se considerar que este tipo de análise por infravermelho portátil não substitui os ensaios em laboratório, principalmente se a amostra estiver fora das especificações da ANP. É preciso considerar que existem desvios inseridos nos modelos matemáticos, maiores que os inseridos pelos equipamentos, e que os ensaios ASTM são as referências para diferenciar amostras conformes e não conformes. Problemas práticos podem ocorrer com um equipamento portátil, principalmente em relação ao seu transporte, pois o sistema ótico é bastante frágil. Porém este problema poderá ser contornado, escolhendo-se sistemas óticos mais robustos com relação às variações de temperatura e vibrações, os quais ocorrem devido ao deslocamento do equipamento.

Outra aplicação interessante seria o de sensor virtual, visando um controle de processo, para manter a qualidade da gasolina dentro das especificações para comercialização. Cromatógrafos podem ser conectados em linha no processo, ou também coleta-se uma amostra e encaminha-se para o laboratório, mas o tempo de resposta é bastante longo em relação a um sensor infravermelho. Com o tempo de resposta mais otimizado, o sensor pode ajudar na tomada de decisões para gerenciamento e otimização do processo. A maior dificuldade em gerenciar este tipo de dispositivo dentro de uma unidade industrial, está relacionada com a fragilidade do sensor IV/ATR, que pode sofrer influência de pressão e temperatura, incrustações, riscos ou danos no cristal de seleneto de zinco. Evidentemente os espectros obtidos com estas fontes de ruído, podem fornecer previsões muito fora da faixa de controle, atrapalhando ou fornecendo previsões errôneas sobre o processo. Para uso industrial, o desenvolvimento de um sensor com proteção, além da melhora na robustez do modelo matemático pode viabilizar a aplicação.

Para obter-se a composição química, por meio de cromatografia gasosa e DHA o tempo é de 3,5 horas, enquanto para as propriedades físico-químicas em laboratório, o tempo para realizar todos os ensaios é de 1 hora, no mínimo. A redução do tempo de análise, tanto para o sensor virtual, quanto para o equipamento portátil, é expressiva. O tempo de análise para uma amostra desconhecida passa a ser de 5 minutos, que é o tempo necessário para aquisição de um espectro infravermelho, previsão de sua composição química e propriedades físico-químicas.

8 SUGESTÕES PARA FUTUROS TRABALHOS

A modelagem matemática ainda pode ser otimizada, estudando-se as faixas ótimas no espectro de infravermelho para cada propriedade, utilizando-se o banco de dados atual.

Uma adição de pontos (amostras) é recomendada para melhorar a robustez do modelo e a capacidade preditiva dos modelos que apresentaram problemas de previsão, melhorando a nuvem de pontos em toda a faixa de trabalho, para cada propriedade estudada.

Sugere-se também o desenvolvimento de um equipamento portátil ou um sensor virtual, inserindo os modelos matemáticos, para testes em campo, adequando-se os bancos de dados conforme a aplicação requerida, utilizando as informações obtidas neste trabalho.

REFERÊNCIAS

AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS – ASTM. **ASTM E 1655**: Standard practices for infrared, multivariate, quantitative analysis. [S./], 1997.

AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS – ASTM. **ASTM D 2425**: Standard test method for hydrocarbon types in middle distillates by mass spectrometry. [S./], 2004.

AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS – ASTM. **ASTM D 2789**: Standard test method for hydrocarbon types in low olefinic gasoline by mass spectrometry. [S./], 2000.

AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS – ASTM. **ASTM D 4052**: Density and relative density of liquids by digital density meter. In: Annual Book of ASTM Standards. [S./], 2002.

AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS – ASTM. **ASTM D 4815**: Standard test method for determination of MTBE, ETBE, TAME, DIPE, tertiary-amyl alcohol and C₁ to C₄ alcohols in gasoline by gas chromatography. [S./], 2003.

AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS – ASTM. **ASTM D 5191**: Vapor pressure of petroleum products – mini method. In: Annual Book of ASTM Standards. [S./], 2004a.

AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS – ASTM. **ASTM D 5580**: S Determination of benzene, toluene, ethylbenzene, p/m-xylene, o-xylene, C₉ and heavier aromatics, and total aromatics in finished gasoline by gas chromatography. [S./], 2002.

AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS – ASTM, **ASTM D 5769**: Standard test method for determination of benzene, toluene, and total aromatics in finished gasolines by gas chromatography/mass spectrometry. [S./], 2004.

AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS – ASTM. **ASTM D 6729**: Determination of individual components in spark ignition engine fuels by 100 metre capillary high resolution gas chromatography. [S./], 2004.

AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS – ASTM. **ASTM D 6730**: Determination of individual components in spark ignition engine fuels by 100-metre capillary (with precolumn) high-resolution gas chromatography. [S./], 2001.

AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS – ASTM. **ASTM D 86**: Distillation of petroleum products. In: Annual Book of ASTM Standards [S./], 2005.

ANDRADE, J. M. *et al.* Non-destructive and clean prediction of aviation fuel characteristics through Fourier transform-Raman spectroscopy and multivariate calibration. **Analytica Chimica Acta**. v. 482, p. 11 – 128, January, 2003.

ANDRADE, B. *et al.* Use of multivariate techniques in quality control of kerosene production. **Fuel**, v. 76, p. 51 – 59, August, 1996.

APICELLA, B. *et al.* A mass spectrometric study of gasoline anti-knocking additives. Part I: Electron impact ionization and fragmentation processes of MTBE. **Int. J. Mass Spectrometry**. v. 262, p. 105 – 113, 2007.

BALABIN, R. M.; SAFIEVA, R. Z.; LOMAKINA, E.I. Comparison of linear and nonlinear calibration models based on near infrared (NIR) spectroscopy data for gasoline properties prediction. **Chemometrics and intelligent laboratory systems**. v. 88, p. 183-188, may, 2007.

BARAK, P. Smoothing and differentiation by an adaptive-degree polynomial filter. **Analytical Chemistry**. v. 67, n. 17, p. 2758-2762, September, 1995.

BARROS, A. S. Segmented Principal Component Transform–Partial Least Squares regression. **Chemometrics and intelligent laboratory systems**. v. 89, p. 59-68, June, 2007.

BLANCO, M. *et al.* Orthogonal signal correction in near infrared calibration. **Analytica Chimica Acta**. v. 434, p. 125 – 132, January, 2001.

BLANCO, M. *et al.* Determination of physico-chemical parameters for bitumens using near infrared spectroscopy. **Analytica Chimica Acta**. v. 434, p. 133 – 141, January, 2001.

BLOMBERG, J.; SCHOENMAKERS, P. J.; BRINKMAN, U. A. Th. Gas chromatographic methods for oil analysis. **Journal of Chromatography A**. v. 972, p. 137 – 171, June, 2002.

BORIN, A.; POPPI, R. J. Application of mid infrared spectroscopy and iPLS for the quantification of contaminants in lubricating oil. **Vibrational Spectroscopy**. v. 37, p. 27 – 32, 2005.

BRAITHWAITE, A.; SMITH, F. J. **Chromatographic methods**. 5th. ed. Dordrecht: Kluwer Academic, 1999, 559 p.

BRERETON, R. G. Introduction to multivariate calibration in analytical chemistry. **Analyst**. v. 125, p. 2125-2154, October, 2000.

BRERETON, R. G. **Applied chemometrics for scientists**. Hoboken: J. Wiley, 2007, 379 p.

CARRACEDO, M. P. G. *et al.* Generation and mid-IR measurement of a gas-phase to predict security parameters of aviation jet fuel. **Talanta**. v. 60, p. 1051 - 1062, March, 2003.

CHAU, F. T. *et al.* **Chemometrics: from basics to wavelet transform**. Hoboken: J. Wiley, 2004, 316p.

CHUNG, H.; KU, M. S.; LEE, J. S. Comparison of near-infrared and mid-infrared spectroscopy for the determination of distillation property of kerosene. **Vibrational Spectroscopy**. v. 20, p. 155 - 163, June, 1999.

CIOLA, R. **Introdução à cromatografia em fase gasosa**. São Paulo: Edgard Blücher, 1973, 231p.

CHROMEDIA – Ionization Techniques for mass spectrometry. Disponível em: <http://www.spectroscopynow.com/coi/cda/detail.cda?id=17191&type=EducationFeature&chId=4&page=1>. Acesso em: 06/11/2007.

COATES, J. **Encyclopedia of analytical chemistry**. Chinchester: J. Wiley, 2000, p. 10815-10837.

CÔCCO, L.C. **Aplicação de redes neuronais artificiais para previsão de propriedades da gasolina a partir de sua composição**. 153 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia) – Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2003.

CÔCCO, L.C., YAMAMOTO, C.I; VON MEIEN, O.F. Study of correlations for physicochemical properties for Brazilian gasoline. **Chemometrics and intelligent laboratory systems**. v. 76, p. 55 – 63, 2005.

CRUZ, J. F. M. **Caracterização de gasolinas por espectroscopia FT-Raman**. 215 f. Tese (Doutorado em Química) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2003.

DELGADO, R. C. O. B.; ARAUJO, A. S.; FERNANDES JR., V. J. Properties of Brazilian gasoline mixed with hydrated ethanol for flex-fuel technology. **Fuel Processing Technology**. v. 88, p. 365 – 368, 2007.

DEMTRÖDER, W. **Laser spectroscopy: basic concepts and instrumentation**. 2nd. ed. New York: Springer, 1996.

DOWNARD, K. **Mass spectrometry: a foundation course**. RSC Publishing, 2004.

ESTIENNE, *et al.* A comparison of multivariate calibration techniques applied to experimental NIR data sets - Part III: robustness against instrumental perturbation conditions. **Chemometrics and intelligent laboratory systems**. v. 73, p. 207 – 218, 2004.

FEARN, T. On orthogonal signal correction. **Chemometrics and intelligent laboratory systems**. v. 50, p. 47 – 52, 2000.

FELÍCIO, C. C. *et al.* Comparison of PLS algorithms in gasoline and gas oil parameter monitoring with MIR and NIR. **Chemometrics and intelligent laboratory systems**. v. 78, p. 74 – 80, February, 2005.

FERREIRA, M. M. C. *et al.* Quimiometria I: calibração multivariada: um tutorial. **Química Nova**. v. 22, n.5, 1999.

FIFIELD, F. W.; KEALEY D. **Principles and practice of analytical chemistry**. London: Blackwell Science, 2000, 5th. ed, 563 p.

FLUMIGNAN, D. L. et al. Screening Brazilian C gasoline quality: Application of the SIMCA chemometric method to gas chromatographic data. **Analytica Chimica Acta**. v. 595, p.128-135, February, 2007.

FLUMIGNAN, D. L. et al. Multivariate calibrations in gas chromatographic profiles for prediction of several physicochemical parameters of Brazilian commercial gasoline. **Chemometrics and intelligent laboratory systems**. v. 92, n.1, p. 53 – 60, 2008.

FORINA, M.; LANTERI, S.; CASALE, M. Multivariate calibration. **Journal of Chromatography A**. v. 1158, p. 61 – 93, march 2007.

GALLIGNANI, M.; GARRIGUES, S.; de la GUARDIA, M. Direct determination of benzene in gasoline by flow injection-fourier transform infrared spectrometry. **Analytica Chimica Acta**. v. 274, p. 267 – 274, 1993a.

GALLIGNANI, M.; GARRIGUES, S.; DE LA GUARDIA, M. Flow injection derivative fourier transform infrared determination of methyl tert-butyl ether in gasolines. **Analytica Chimica Acta**. v. 282, p. 543 – 550, 1993b.

GALLIGNANI, M. *et al.* Comparative study of different approaches for the flow injection-fourier transforms infrared determination of toluene in gasolines. **Talanta**. v. 41, n.5, p. 739 – 745, 1994.

GARRIGUES, S. *et al.* Multivariate calibrations in Fourier transform infrared spectrometry for prediction of kerosene properties. **Analytica Chimica Acta**. v. 317, p. 95 – 105, August, 1995.

GALVÃO, R. K. H. *et al.* A method for calibration and validation subset partitioning. **Talanta**. v. 67, p. 736 – 740, May, 2005.

GALVÃO, R. K. H. *et al.* An application of subbagging for the improvement of prediction accuracy of multivariate calibration models. **Chemometrics and intelligent laboratory systems**. v. 81, p. 60 – 67, 2006.

GAUGLITZ, G.; VO-DINH, T. **Handbook of spectroscopy**. Weinheim: Wiley VCH Verlag GmbH. 2003, v.1, 538 p.

GELADI, P. Some recent trends in the calibration literature. **Chemometrics and intelligent laboratory systems**. v. 60, p. 211 – 224, 2002.

GEMPERLINE, P. **Practical guide to chemometrics**. 2nd. ed. London: Taylor & Francis Group, 2006, 520 p.

GEORGE, W. O. and WILLIS, H. A. **Computer methods in UV, visible and IR spectroscopy**. Cambridge: Royal Society of Chemistry, 1990, 216 p.

GORRY, P. A. General least-squares smoothing and differentiation by the convolution (Savitsky-Golay) method. **Analytical Chemistry**. v. 62, n.6, p. 570 – 573, march, 1990.

GS 1000– Multi function portable fuel analyzer. Operating Manual. PETROSPEC: September 2000, 38p.

HARVEY, D. **Modern analytical chemistry**. Boston: Mc Graw Hill, 2000, 798 p.

HERBERT, C. G.; JOHNSTONE, R. A. W. **Mass spectrometry basics**. New York: CRC Press, 2002, 474 p.

HOFFMANN, E.; STROOBANT, V. **Mass spectrometry: principles and applications**. 2nd. ed. New York: J. Wiley & Sons, 2002, 407 p.

IROX 2000 – Gasoline analyser. Operating Manual. Gabner: February 2001, 61p.

IOB, A.; BUENAFE, R.; ABBAS, N. M. Determination of oxygenates in gasoline by FTIR. **Fuel**. v. 77, p. 1861 -1864, May, 1998.

KALIVAS, J. H. Two data sets of near infrared spectra. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**. v. 37, p. 255 – 259, 1997.

KAPUR, G.S.; SINGH, A.P.; SARPAL, A. S. Determination of aromatics and naphthenes in straight run gasoline by ¹H NMR spectroscopy. **Fuel**. v. 79, p. 1023 - 1029, 2000.

KARASEC, F. W.; CLEMENT, R. E. **Basic gas chromatography - mass spectrometry: principles and techniques**. Amsterdam: Elsevier, 2003, 3rd imp, 201 p.

KENKEL, J. V. **Analytical chemistry for technicians**. USA: CRC Press, 2003, 3rd ed. 545 p.

KIM, K.; LEE, J. M.; LEE, I. B. A novel multivariate regression approach based on kernel partial least square with orthogonal signal correction. **Chemometrics and intelligent laboratory systems**. v. 79, p. 22 – 30, 2005.

KITSON, F. G.; LARSEN, B. S.; Mc EWEN, C. H. **Gas chromatography and mass spectrometry: a practical guide**. London: Academic Press, 1996, 380 p.

LACAUT_{ets} – Laboratório de Combustíveis Automotivos da UFPR. Aplicação de PCA em dados experimentais de diesel tipo B e D, 2007.

LACAUT_{ets}/UFPR - Equipamento presente no Laboratório de Combustíveis Automotivos da UFPR.

LAI, W. C.; SONG, C. Temperature-programmed retention indices for GC and GC-MS analysis of coal and petroleum-derived liquid fuels. **Fuel**. v. 74, n. 10, p. 1436 - 1451, November, 1994.

LANZER, T.; VON MEIEN, O. F.; YAMAMOTO, C. I. A predictive thermodynamic model for the Brazilian gasolina. **Fuel**. v. 84, p. 1099 - 1104, January, 2005.

LINDON, J.C.; TRANTER, G. E.; HOLMES, J. L. **Encyclopedia of spectroscopy and spectrometry**. London: Academic Press, 2000, v.1, 1207 p.

LITANI-BARZILAI, I. *et al.* On-line remote prediction of gasoline properties by combined optical methods. **Analytica Chimica Acta**. v. 339, p. 193 -199, 1997.

MACHO, S.; LARRECHI, M.S.. Near infrared spectroscopy and multivariate calibration for the quantitative determination of certain properties in the petrochemical industry. **Trends in Analytical Chemistry**. v. 21, n.12, p. 799 -806, 2002.

MAKHOUKHI, N. *et al.* Determination of the composition of a mixture of gases by infrared analysis and chemometric methods. **Journal of Molecular Structure**. v. 744 - 747, p. 855 -859, March, 2005.

MALLINCKRODT CHEMICALS – MSDS - Material Safety Data Sheet. Disponível em: <http://www.jtbaker.com/msds/englishhtml/M7700.htm>. Acesso em: 17/04/2008.

MAYO, D. W.; MILLER, F. A.; HANNAH R. W. **Course notes on the interpretation of infrared and raman spectra**. Hoboken: J. Wiley, 2003, 567 p.

MONETI, G. *et al.* Acetonitrile in chemical ionization of monounsaturated hydrocarbons: a ^{13}C and ^2H labeling study. **Journal of Mass Spectrometry**. v. 33, p. 1148 - 1149, June, 1998.

MULLER M. R. **Fundamentals of quantum chemistry: molecular spectroscopy and modern electronic structure computations**. New York: Kluwer Academic, 2001, 265p.

OLIVEIRA F. C. C. *et al.* A escolha da faixa espectral no uso combinado de métodos espectroscópicos e quimiométricos. **Química Nova**. v. 27, n.2, p. 218-225, Abril, 2004.

OLIVEIRA F. S. *et al.* Screening analysis to detect adulterations in Brazilian gasoline samples using distillation curves. **Fuel**. v. 83, p. 917-923, 2004.

PASQUINI, C.; BUENO, A. F. Characterization of petroleum using near-infrared spectroscopy: Quantitative modeling for the true boiling point curve and specific gravity. **Fuel**. v. 86, p. 1927 - 1934, February, 2007.

PAVÓN, J. L. P. *et al.* Differentiation of types of crude oils in polluted soil samples by headspace-fast gas chromatography–mass spectrometry. **Journal of Chromatography A**. v. 1047, p. 101 - 109, July, 2004.

PAVÓN, J. L. P. *et al.* Detection of soil pollution by hydrocarbons using headspace–mass spectrometry and identification of compounds by headspace–fast gas chromatography–mass spectrometry. **Journal of Chromatography A**. v. 1137, p. 101 - 109, October, 2006.

PAVÓN, J. L. P. *et al.* Determination of benzene in gasoline using direct injection-mass spectrometry. **Analytica Chimica Acta**. v. 576, p. 156 - 162, June, 2006.

PAVÓN, J. L. P. *et al.* Determination of naphthalene and total methylnaphthalenes in gasoline using direct injection-mass spectrometry. **Talanta**. v. 72, p. 256 - 262, 2007.

PIERNA, J. A. F. *et al.* Direct orthogonalization: some case studies. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**. v. 55, p. 101 - 108, 2001.

POOLE F. C. **The essence of chromatography**. Detroit: Elsevier, 2002, 936p.

POPPI, R. J. **Quantificação de picos cromatográficos superpostos por métodos de calibração multivariada**. 107 f. Dissertação (Mestrado em Química) – Universidade Estadual de Campinas. Campinas, 1989.

RAMOS, A. C. M.; ANTONIOSI FILHO, N. R. Desenvolvimento de metodologia cromatográfica para determinação de adulteração em álcool etílico hidratado (AEHC). In: CONGRESSO DE PESQUISA, ENSINO E EXTENSÃO DA UFG – CONPEEX, 2., 2005, Goiânia. **Anais eletrônicos do XII seminário de iniciação científica [CD-ROM]**, Goiânia: UFG, 2005.

REBOUCAS, M. V.; SANTOS, E. C.; VIEIRA, F. S. V. Feasibility of quality process control of a naphtha fractioning unit based on near-infrared spectroscopic prediction of physical and chemical properties of medium naphtha streams. **Vibrational Spectroscopy**. v. 44, p. 187 - 191, 2007.

RIBEIRO, F. A. L. **Aplicação de métodos de análise multivariada no estudo de hidrocarbonetos policíclicos aromáticos**. 174 f. Dissertação (Mestrado em Química) – Universidade Estadual de Campinas. Campinas, 2001.

ROCHA DA LUZ, E. **Predição de propriedades de gasolinas usando espectroscopia FTIR e regressão por mínimos quadrados parciais**. 109 f. Dissertação (Mestrado em Química) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro, 2003.

SACORAGUE, L. A. **Avaliação de diferentes regiões do espectro do infravermelho próximo na determinação de parâmetros de qualidade de combustíveis empregando ferramentas quimiométricas**. 234 f. Tese (Doutorado em Química) – Universidade Estadual de Campinas. Campinas, 2004.

SANTOS, R. N. F. *et al.* Improvement of prediction ability of PLS models employing the wavelet packet transform: A case study concerning FT-IR determination of gasoline parameters. **Talanta**. v. 71, p. 1136-1143, 2007.

SANTOS JR. V. O. *et al.* A comparative study of diesel analysis by FTIR, FTNIR and FT-Raman spectroscopy using PLS and artificial neural network analysis. **Analytica Chimica Acta**. v. 547, p. 188-196, June, 2005.

SAVITZKI, A.; GOLAY, M. J. E. Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures. **Analytical Chemistry**. v. 36, n. 8, p. 1627-1638, July 1964.

SILVA, R. *et al.* Effect of additives on the antiknock properties and Reid vapor pressure of gasoline. **Fuel**. v. 84, p. 951-959, January, 2005.

SILVERSTEIN, R. M.; BASSLER, G. C.; MORRILL, T. C. **Identificação espectrométrica de compostos orgânicos**. Rio de Janeiro: Guanabara Koogan, 1994.

SILVERSTEIN, R. M.; WEBSTER, F. X. **Spectrometric identification of organic compounds**. 6th. ed. New York: J. Wiley & sons, 1998, 482 p.

SKOOG, D. A.; HOLLER, F. J.; NIEMAN, T. A. **Princípios de análise instrumental**. 5. ed. Madrid: McGraw-Hill, 2001, 1028 p.

SOJÁK, L. *et al.* Capillary gas chromatography–mass spectrometry of all 93 acyclic octenes and their identification in fluid catalytic cracked gasoline. **Journal of Chromatography A**. v. 1025, p. 237-253, October, 2004.

STARDHA™ - DETAILED HYDROCARBON ANALYSIS SOFTWARE: Operation Manual. Walnut Creek: Varian Analytical Instruments. Versão 5. 2000.

STUART, B. **Infrared spectroscopy**: fundamentals and applications. 2nd. ed. New York: J. Wiley & sons, 2004, 203 p.

SVANBERG, S. **Atomic and molecular spectroscopy**: basic aspects and practical applications. 2nd. ed. Berlin: Springer-Verlag, 1992, 405 p.

TAKESHITA, E. V. *et al.* Influence of solvent addition on the physicochemical properties of Brazilian gasoline. **Fuel**. v. 87, p. 2168-2177, August, 2008.

TEIXEIRA, L. S. G. *et al.* Multivariate calibration in Fourier transform infrared spectrometry as a tool to detect adulterations in Brazilian gasoline. **Fuel**. v. 87, p.346-352, June, 2007.

TKACHENKO N, V, **Optical spectroscopy**: methods and instrumentations, New York: Elsevier, 2005, 307p.

TRYGG, J.; WOLD, S. Orthogonal projections to latent structures (O-PLS). **Journal of Chemometrics**. v. 16, p. 119 -128, 2002.

VAN BRAMER S. E. **An introduction to mass spectrometry**. Chester: Science Widener. 1998, 38p.

VARIAN Inc. FTIR- Spectroscopy Products. Disponível em: <http://www.varianinc.com/cgi-bin/nav?products/spectr/ftir/index&cid=KINIPMHOFM>. Acesso em: 06/12/2007.

VON MÜHLEN, C. *et al.* Applications of comprehensive two-dimensional gas chromatography to the characterization of petrochemical and related samples. **Journal of Chromatography A**. v. 1105, p. 39 - 50, 2006.

VÉKEY, K. Mass spectrometry and mass-selective detection in chromatography. **Journal of Chromatography A**. v, 921, p. 227-236, april, 2001.

WANG, Z.; FINGAS, M. Development of oil hydrocarbon fingerprint and identification techniques. **Marine Pollution Bulletin**. v. 47, p. 423-452, 2003.

WIEDEMANN, L. S. M.; DAVILA, L. A.; AZEVEDO, D. A. Adulteration detection of Brazilian gasoline samples by statistical analysis. **Fuel**. v. 84, p. 467-473, 2005.

WOLD, S. *et al.* Orthogonal signal correction of near infrared spectra. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**. v. 44, p. 175 -185, june, 1998.

WOLD, S. *et al.* Some recent developments in PLS modeling. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**. v. 58, p. 131 -150, 2001.

WOLD, S.; SJÖSTRÖM. M.; ERIKSSON, L. PLS-regression: a basic tool of chemometrics. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**. v. 58, p. 109 - 130, 2001.

WORKMAN, JR. J. The state of multivariate thinking for scientists in industry: 1980–2000. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**. v.60, p. 13-23, 2002.

WU, W. *et al.* Using contrasts as data pretreatment method in pattern recognition of multivariate data. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**. v.45, p. 39-53, 1999.

ZANATA, D. R. P. **Desenvolvimento de sensor virtual empregando redes neurais para medição da composição em uma coluna de destilação**. 229 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia) – Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. São Paulo, 2005.

ZHU, X. *et al.* The classification of hydrocarbons with factor analysis and the PONA analysis of gasoline. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**. v.45, p. 147-155, 1999.

DOCUMENTOS CONSULTADOS

BARBOSA L. C. de A.. **Introdução à química orgânica**. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2006, 2. ed, 311 p.

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ. Sistema de Bibliotecas. **Teses, dissertações, monografias e trabalhos acadêmicos**. 2 ed. Curitiba: Editora UFPR. 2007. (Normas para apresentação de documentos científicos, 2).

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ. Sistema de Bibliotecas. **Citações e notas de rodapé**. 2 ed. Curitiba: Editora UFPR. 2007. (Normas para apresentação de documentos científicos, 3).

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ. Sistema de Bibliotecas. **Referências**. 2 ed. Curitiba: Editora UFPR. 2007. (Normas para apresentação de documentos científicos, 4).

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ, Sistema de Bibliotecas. **Redação e editoração**. 2 ed. Curitiba: Editora UFPR. 2007. (Normas para apresentação de documentos científicos, 9).

APÊNDICE A – PROPRIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS E COMPOSIÇÃO QUÍMICA DAS AMOSTRAS UTILIZADAS NESTE ESTUDO

TABELA 1 – PROPRIEDADES FÍSICO QUÍMICAS DAS AMOSTRAS

CONTINUA

Amostra	T ₁₀ (°C)	T ₅₀ (°C)	T ₉₀ (°C)	PFE (°C)	M. Esp. (kg/m ³)	PV Reid (kPa)
GA01	55,7	72,7	166,7	214,3	755,1	...
GA02	54,4	71,2	163,1	207,6	752,7	...
GA03	54,9	72,1	161,2	208,8	753,3	...
GA04	55,8	72,3	160,9	206,5	753,4	...
GA05	56,0	72,4	162,4	209,4	754,6	50,2
GA06	54,2	72,1	159,1	207,9	752,2	52,7
GA07	54,6	72,8	160,2	203,1	752,8	53,0
GA08	55,4	72,3	165,0	210,0	751,8	53,9
GA09	55,4	73,0	168,1	217,0	759,2	52,2
GA10	55,3	72,1	167,1	212,1	755,9	53,4
GA11	54,9	73,4	162,9	209,4	760,8	51,8
GA12	54,9	72,7	165,4	210,5	754,8	52,6
GA13	58,3	72,9	168,9	209,8	761,1	45,0
GA14	55,3	72,2	166,1	212,4	754,2	51,8
GA15	58,4	74,9	144,3	203,1	767,9	49,7
GA16	55,8	72,3	159,9	208,7	752,4	52,5
GA17	56,1	73,0	174,8	271,8	759,5	...
GA18	53,6	73,5	173,1	205,2	764,1	54,7
GA19	54,2	72,2	163,2	208,7	751,5	53,4
GA20	53,4	72,7	163,8	207,3	753,6	52,7
GA21	53,9	72,4	163,3	208,9	754,5	53,5
GA22	55,9	73,1	167,8	220,5	753,3	52,8
GC01	53,8	72,0	162,7	206,4	752,3	...
GC02	57,3	74,5	151,3	206,3	766,3	...
GC03	56,3	72,5	166,4	221,4	754,5	...
GC04	55,4	72,4	161,7	207,5	753,2	...
GC05	65,1	73,1	155,2	198,1	758,6	...
GC07	56,6	72,4	170,8	248,3	755,4	...
GC08	56,0	73,7	167,0	194,3	757,4	...
GC09	56,2	73,7	155,5	204,6	762,1	...
GC10	54,6	72,3	165,0	233,2	754,2	51,5
GC11	54,4	72,4	166,1	211,0	756,1	54,3
GC12	53,8	72,0	164,1	210,2	752,5	54,3
GC13	54,8	72,0	161,6	206,6	753,0	...
GC14	53,7	72,8	158,1	198,2	751,5	...
GC15	55,5	71,2	165,8	209,3	749,0	...
GC16	55,6	72,5	160,4	210,1	754,5	53,8
GC17	55,5	72,3	163,4	209,1	754,5	...
GC18	56,8	72,6	168,8	230,8	756,8	...
GC19	54,4	71,7	163,3	208,5	751,0	...
GC20	56,8	73,9	155,4	206,4	762,7	...
GC21	56,6	72,8	157,7	205,1	755,5	...
GC22	54,1	72,0	161,8	206,3	751,9	...
GC23	56,1	72,7	162,0	212,1	754,4	53,0
GC24	54,9	72,6	161,2	206,1	753,5	52,5
GC25	54,0	72,0	165,0	220,5	752,7	54,1

CONTINUA						
Amostra	T ₁₀ (°C)	T ₅₀ (°C)	T ₉₀ (°C)	PFE (°C)	Densidade (kg/m ³)	PV Reid (kPa)
GC26	54,3	72,1	167,7	211,8	755,0	54,3
GC27	55,1	72,6	163,2	208,4	756,4	52,9
GC28	55,7	73,2	166,0	213,9	760,2	51,2
GC29	57,3	74,6	149,9	206,2	768,0	50,5
GC30	54,4	73,0	168,1	211,2	758,3	51,6
GC31	53,6	72,4	167,6	209,5	756,3	53,8
GC32	54,6	72,1	168,7	223,5	756,4	53,0
GC33	54,2	73,3	163,2	209,1	759,0	52,8
GC34	54,8	72,2	166,0	209,7	754,1	52,7
GC35	54,6	72,3	166,4	209,2	754,0	52,4
GC36	55,1	72,1	167,8	224,7	755,6	50,1
GC37	55,8	72,8	162,8	235,6	758,3	49,8
GC38	56,6	72,6	165,5	233,7	756,9	50,5
GC39	53,2	72,4	159,7	206,7	753,8	52,0
GC40	55,4	72,4	166,2	223,6	753,6	52,2
GC41	59,8	68,2	140,3	175,9	741,5	40,0
GC42	61,1	69,3	136,9	179,3	751,4	38,6
GC43	54,7	72,1	163,4	223,8	753,2	52,8
GC44	51,2	72,3	160,0	230,6	748,0	63,8
GC45	55,4	73,1	157,9	210,7	756,8	53,1
GC46	54,6	73,4	190,6	323,2	760,3	54,0
GC47	55,7	71,9	164,6	224,3	752,6	51,6
GC48	56,7	73,2	150,9	209,2	758,7	51,3
GC49	55,0	72,6	162,0	214,2	754,7	50,8
GC50	55,6	72,8	187,1	327,9	760,5	48,9
GC51	59,5	71,2	149,5	198,9	750,1	52,6
GC52	50,1	70,7	157,6	210,7	742,7	66,3
GC53	54,8	72,5	159,2	207,7	754,1	43,8
GC54	50,4	72,3	160,8	252,8	748,7	62,6
GC55	61,3	71,5	149,4	192,6	743,9	40,2
GC56	54,0	71,8	159,7	207,4	751,8	53,5
GC57	54,9	72,5	164,6	235,2	755,6	51,9
GC58	55,3	73,1	166,6	211,0	756,8	51,7
GC59	63,0	68,6	105,8	173,9	736,9	35,7
GC60	58,4	74,2	161,1	209,3	762,8	47,5
GC61	62,9	73,0	138,1	201,2	747,7	39,2
GC62	58,4	73,8	163,9	211,8	761,4	47,6
GC63	54,4	72,4	165,4	208,7	754,3	53,6
GC64	55,2	72,6	160,4	210,9	752,6	56,5
GC65	55,7	72,7	167,4	233,4	756,0	50,5
GC66	69,4	71,3	102,1	135,0	746,9	26,0
GC67	56,1	73,0	174,8	271,8	740,3	39,4
GC68	54,7	73,0	157,9	209,3	755,6	50,1
GC69	55,3	72,5	166,5	232,3	755,9	50,5
GC70	55,6	73,3	161,4	209,8	758,3	51,0
GC71	56,7	73,6	162,5	210,8	761,7	50,4
GC72	65,2	71,4	98,1	179,2	759,7	35,2
GC73	56,8	73,6	153,5	207,0	761,9	49,8
GC74	65,8	69,8	105,3	158,1	745,7	31,1
GC75	65,9	71,5	107,7	167,6	751,0	32,9
GC76	53,3	72,0	156,8	210,8	745,8	57,5

Amostra	T ₁₀ (°C)	T ₅₀ (°C)	T ₉₀ (°C)	PFE (°C)	Densidade (kg/m ³)	CONCLUSÃO
						PV Reid (kPa)
GC77	56,0	72,8	169,9	229,1	757,3	51,4
GC78	55,9	73,0	159,0	207,6	757,0	50,8
GC79	57,7	72,8	169,1	232,3	758,1	48,0
GC80	56,2	72,0	164,7	216,7	758,3	49,9
GC81	55,0	72,5	164,7	210,4	760,8	52,2
GC82	55,2	72,8	166,4	229,8	755,8	52,3
GC83	51,7	69,9	151,0	215,1	741,2	60,3
GC84	57,2	73,5	157,4	208,3	759,0	50,5
GC85	58,8	71,0	140,6	201,7	750,4	43,7
GC86	59,5	65,0	107,6	182,3	739,7	40,4
GC87	75,1	76,0	131,1	195,3	767,3	18,4
GC88	70,5	74,7	129,9	197,7	757,3	25,9
GC89	55,4	73,7	160,0	207,3	760,9	52,5
GC90	55,1	72,0	167,1	210,6	753,0	53,2
GC91	58,9	67,1	138,5	190,0	738,8	42,5
GC92	68,9	70,9	103,5	139,1	748,3	27,5
GC93	55,1	72,8	163,1	209,7	755,7	53,0
GC94	65,6	71,8	182,1	210,0	759,1	32,3
GC95	54,0	72,0	166,0	224,5	754,9	52,3
GC96	56,0	73,8	160,0	205,9	762,0	52,5
GC97	61,1	72,1	141,1	195,4	754,4	42,6
GC98	56,5	74,5	150,6	204,4	765,0	50,9
GC99	66,0	72,0	176,9	211,9	752,1	31,4
GC100	53,5	72,1	169,9	210,5	754,9	54,3
GC101	60,9	64,7	103,0	169,2	738,4	38,1
GC102	55,3	72,8	168,1	223,2	755,5	56,5
GC103	52,2	71,9	170,1	212,3	754,8	58,1
GC104	52,8	72,2	171,1	211,8	754,4	55,9
GC105	51,7	71,9	170,7	213,7	754,5	59,0
GC106	52,3	71,6	168,6	209,6	753,3	58,0
GC107	58,7	71,9	171,5	211,3	754,2	58,8

TABELA 2 – COMPOSIÇÃO QUÍMICA DAS AMOSTRAS

Amostra	CONTINUA					
	Aromáticos	Isoparaf,	Naftênicos	Olefínicos	Oxigenados	Parafínicos
GA 01	15,7	16,4	13,6	15,3	24,3	11,5
GA 02	16,7	19,0	16,9	14,2	18,3	12,3
GA 03	15,3	16,2	14,1	14,8	24,7	11,5
GA 04	14,9	16,7	13,9	14,4	26,1	11,5
GA 05	16,1	16,4	14,3	14,6	24,4	11,5
GA 06	14,8	16,3	13,5	15,0	25,7	12,1
GA 07	14,3	16,1	13,2	16,0	26,7	11,3
GA 08	15,3	16,8	13,3	16,0	24,3	11,7
GA 09	16,8	14,7	12,1	16,9	27,7	9,1
GA 10	17,0	15,4	12,3	18,2	24,5	9,3
GA 11	15,4	14,5	11,5	16,5	31,0	8,5
GA 12	17,1	16,5	12,3	17,0	24,2	10,3
GA 13	17,0	15,6	14,0	14,6	25,6	9,8
GA 14	16,9	16,6	12,7	16,7	23,6	10,7
GA 15	11,0	12,1	10,6	10,0	45,6	9,1
GA 16	15,1	17,2	15,4	13,4	24,0	12,0
GA 17	17,0	15,8	15,1	13,9	23,2	11,0
GA 18	18,5	15,2	14,6	13,8	23,5	11,5
GA 19	13,2	18,0	14,4	11,9	24,1	12,3
GA 20	15,2	18,2	13,8	11,8	25,2	11,8
GA 21	14,9	17,6	13,7	12,4	25,1	11,7
GA 22	15,3	17,8	13,7	12,4	24,7	11,7
GC 01	15,8	16,2	12,9	15,1	23,0	11,3
GC 02	11,9	12,6	10,6	12,0	42,0	8,6
GC 03	16,3	16,7	13,9	15,8	23,7	10,7
GC 04	14,9	16,5	13,9	14,4	25,9	11,6
GC 05	14,1	15,7	27,0	5,5	20,6	12,2
GC 07	14,5	16,7	15,9	13,4	23,3	12,0
GC 08	14,7	16,4	13,0	12,6	24,8	14,3
GC 09	13,2	13,9	11,3	12,8	36,3	9,8
GC 10	15,2	16,8	15,5	14,3	23,5	11,8
GC 11	16,8	15,6	11,7	17,8	25,7	9,7
GC 12	16,1	15,9	12,7	17,0	24,2	11,5
GC 13	15,6	16,9	14,7	14,6	24,4	11,3
GC 14	15,1	18,0	10,8	15,4	26,0	11,4
GC 15	16,3	17,3	14,1	16,8	19,9	12,9
GC 16	14,6	15,4	12,4	15,4	28,3	11,4
GC 17	16,1	16,2	14,2	15,5	24,9	10,6
GC 18	16,4	16,5	14,0	15,5	24,0	10,9
GC 19	15,6	16,5	13,3	16,2	23,8	12,2
GC 20	13,0	13,8	11,1	12,5	37,2	8,7
GC 21	14,1	16,7	14,0	12,2	29,5	11,3
GC 22	15,5	16,6	13,2	15,1	24,9	12,0
GC 23	15,1	16,2	13,4	14,9	26,3	11,5
GC 24	15,5	16,5	13,7	15,3	24,7	11,7
GC 25	15,6	16,8	13,5	15,5	23,7	12,1
GC 26	17,3	15,4	12,3	18,4	23,7	10,1
GC 27	15,6	15,0	12,4	16,0	27,9	10,4
GC 28	16,7	14,7	12,1	16,7	27,9	9,1
GC 29	12,0	12,3	10,4	11,6	43,1	8,5
GC 30	17,8	14,9	11,9	18,1	24,8	9,4

CONTINUA

Amostra	Aromáticos	Isoparaf,	Naftênicos	Olefinicos	Oxigenados	Parafinicos
GC 31	17,8	15,1	11,7	19,2	23,6	9,4
GC 32	17,5	15,2	12,0	18,3	24,2	9,8
GC 33	16,1	14,5	11,8	16,9	29,2	8,8
GC 34	16,5	16,2	13,3	16,5	24,1	10,8
GC 35	17,2	16,6	12,5	16,6	24,1	10,6
GC 36	16,6	16,3	13,3	16,0	24,2	11,0
GC 37	14,4	15,6	13,6	13,0	29,8	11,4
GC 38	14,4	16,0	13,9	13,5	27,8	11,7
GC 39	16,0	16,6	13,1	15,1	25,1	11,5
GC 40	16,1	16,7	13,9	14,8	23,9	12,2
GC 41	10,2	24,3	19,3	3,2	24,7	17,0
GC 42	10,5	14,4	31,3	3,6	25,0	14,1
GC 43	15,2	16,4	15,1	14,2	23,4	12,0
GC 44	15,5	18,7	10,0	13,4	24,4	15,6
GC 45	14,1	14,8	13,6	13,5	30,7	10,8
GC 46	15,8	16,3	11,5	14,7	24,9	12,3
GC 47	15,5	16,2	14,5	14,6	23,7	12,8
GC 48	13,3	14,9	13,4	11,5	34,2	10,5
GC 49	15,9	16,2	15,0	13,0	25,8	11,6
GC 50	15,8	15,8	14,3	14,4	23,5	12,5
GC 51	14,6	15,5	13,8	13,4	28,1	12,0
GC 52	14,2	19,9	11,6	13,1	24,1	15,0
GC 53	10,3	18,2	20,0	6,6	25,8	17,0
GC 54	15,9	17,7	10,0	13,6	24,5	15,2
GC 55	13,4	27,0	10,4	7,2	24,3	15,0
GC 56	15,5	16,3	15,1	14,2	24,1	12,1
GC 57	15,1	16,2	14,5	13,5	26,6	11,5
GC 58	17,1	15,4	14,3	16,2	24,0	10,1
GC 59	4,0	23,1	27,5	1,9	25,1	17,9
GC 60	15,1	13,5	12,8	12,5	34,6	8,8
GC 61	9,9	18,6	20,6	7,2	23,9	18,1
GC 62	15,8	14,3	13,4	13,3	30,9	9,4
GC 63	16,4	16,3	14,5	15,1	24,0	10,9
GC 64	14,6	16,8	13,2	14,0	26,7	12,2
GC 65	15,7	16,5	15,7	13,3	23,9	12,1
GC 66	4,2	18,1	38,5	0,9	23,0	14,0
GC 67	1,9	13,9	43,0	1,5	22,0	16,5
GC 68	15,2	16,1	15,0	12,3	26,0	10,7
GC 69	15,0	16,0	14,7	12,2	26,0	10,8
GC 70	14,4	14,5	14,0	13,2	29,1	10,0
GC 71	14,2	14,0	13,1	13,9	31,3	9,0
GC 72	9,6	13,9	23,7	3,6	36,0	12,5
GC 73	13,4	13,9	13,1	10,6	36,5	8,8
GC 74	4,3	15,8	38,8	2,2	23,3	14,0
GC 75	10,4	16,3	27,0	3,3	26,5	15,9
GC 76	11,9	18,0	12,5	12,2	27,4	14,2
GC 77	15,8	13,4	12,7	16,3	25,2	10,2
GC 78	14,9	14,7	13,9	11,6	29,3	10,6
GC 79	16,4	18,2	14,0	10,0	24,5	12,5
GC 80	15,5	15,6	14,0	14,7	25,8	10,3
GC 81	16,2	17,7	13,5	11,9	26,1	11,0
GC 82	16,2	19,5	13,1	9,0	25,3	13,6

Amostra	CONCLUSÃO					
	Aromáticos	Isoparaf,	Naftênicos	Olefinicos	Oxigenados	Parafínicos
GC 83	13,8	21,1	9,9	18,1	20,5	12,9
GC 84	14,3	16,4	12,8	10,4	32,3	10,8
GC 85	11,4	17,7	23,7	7,8	24,5	12,7
GC 86	2,2	15,3	40,5	1,7	24,0	15,4
GC 87	9,4	13,3	22,6	0,3	35,8	15,2
GC 88	8,3	10,4	24,3	1,0	32,9	17,8
GC 89	14,8	16,5	11,9	11,5	32,1	9,9
GC 90	17,2	19,5	16,4	11,4	19,0	12,1
GC 91	4,6	18,7	27,2	1,4	23,6	22,8
GC 92	4,9	17,7	38,0	1,4	23,5	14,3
GC 93	16,2	18,0	13,1	12,3	25,8	10,7
GC 94	16,4	16,5	23,9	2,9	20,4	16,3
GC 95	15,8	18,5	13,9	12,3	24,2	11,4
GC 96	15,5	16,1	11,5	11,4	31,0	11,0
GC 97	14,4	17,6	21,0	7,6	23,8	13,0
GC 98	12,1	11,7	10,8	11,7	40,4	9,0
GC 99	15,1	24,4	17,8	2,7	20,1	16,2
GC 100	18,2	18,5	14,4	14,6	19,3	10,2
GC 101	1,3	15,6	46,2	0,5	19,0	16,5
GC 102	16,6	17,8	13,7	13,8	23,8	10,3
GC 103	19,2	18,3	12,7	16,8	19,2	9,3
GC 104	18,9	18,3	13,2	16,3	19,1	9,8
GC 105	19,4	18,7	12,2	17,3	19,4	8,8
GC 106	18,2	19,3	13,8	14,3	19,1	11,3
GC 107	18,7	19,1	12,8	12,5	19,8	9,7

							CONCLUSÃO	
Corrosividade ao Cobre a 50°C, 3h, máx.	—	1	1	1	1	NBR 14359	D 130	
Enxofre, máx. (14)	% massa	0,12	0,10	0,12	0,10	NBR 6563 NBR 14533	D 1266 D 2622 D 3120 D 4294 D 5453	
Benzeno, máx. (14)	%vol	1,2	1,0	1,9	1,5	—	D 3606 D 5443 D 6277	
Chumbo, máx. (5)	g/L	0,005	0,005	0,005	0,005	—	D 3237	
Aditivos (15)	—	—	—	—	—	—	—	
Hidrocarbonetos: (14) (16)	%vol					MB 424	D 1319	
Aromáticos, máx. (17)		57	45	57	45			
Olefínicos, máx. (17)		38	30	38	30			

(1) De incolor a amarelada, isenta de corante.

(2) De incolor a amarelada se isenta de corante cuja utilização é permitida no teor máximo de 50ppm com exceção da cor azul, restrita à gasolina de aviação

(3) A visualização será realizada em proveta de vidro, conforme a utilizada no Método NBR 7148 ou ASTM D 1298.

(4) Límpido e isento de impurezas.

(5) Proibida a adição. Deve ser medido quando houver dúvida quanto à ocorrência de contaminação.

(6) O AEAC a ser misturado às gasolinas automotivas para produção da gasolina C deverá estar em conformidade com o teor e a especificação estabelecidos pela legislação em vigor.

(7) No intuito de coibir eventual presença de contaminantes o valor da temperatura para 90% de produto evaporado não poderá ser inferior à 155 °C para gasolina A e 145°C para gasolina C.

(8) A Refinaria, a Central de Matérias-Primas Petroquímicas, o Importador e o Formulador deverão reportar o valor das octanagem MON e do IAD da mistura de gasolina A, de sua produção ou importada, com AEAC no teor mínimo estabelecido pela legislação em vigor.

(9) Fica permitida a comercialização de gasolina automotiva com MON igual ou superior a 80 até 30/06/2002.

(10) Índice antidetonante é a média aritmética dos valores das octanagens determinadas pelos métodos MON e RON.

(11) Para os Estados do Rio Grande do Sul, Santa Catarina, Paraná, São Paulo, Rio de Janeiro, Espírito Santo, Minas Gerais, Mato Grosso, Mato Grosso do Sul, Goiás e Tocantins, bem como para o Distrito Federal, admite-se, nos meses de abril a novembro, um acréscimo de 7,0kPa ao valor máximo especificado para a Pressão de Vapor.

(12) A Refinaria, a Central de Matérias-Primas Petroquímicas, o Importador e o Formulador deverão reportar o valor do Período de Indução da mistura de gasolina A, de sua produção ou importada, com AEAC no teor máximo estabelecido pela legislação em vigor.

(13) O ensaio do Período de Indução só deve interrompido após 720 minutos, quando aplicável, em pelo menos 20% das bateladas comercializadas. Neste caso, e se interrompido antes do final, deverá ser reportado o valor de 720 minutos.

(14) Os teores máximos de Enxofre, Benzeno, Hidrocarbonetos Aromáticos e Hidrocarbonetos Olefínicos permitidos para a gasolina A referem-se àquela que transformar-se-á em gasolina C através da adição de $22\% \pm 1\%$ de álcool. No caso de alteração legal do teor de álcool na gasolina os teores máximos permitidos para os componentes acima referidos serão automaticamente corrigidos proporcionalmente ao novo teor de álcool regulamentado.

(15) Utilização permitida conforme legislação em vigor, sendo proibidos os aditivos a base de metais pesados.

(16) Fica permitida alternativamente a determinação dos hidrocarbonetos aromáticos e olefínicos por cromatografia gasosa. Em caso de desacordo entre resultados prevalecerão os valores determinados pelos ensaios MB424 e D1319.

(17) Até 30/06/2002 os teores de Hidrocarbonetos Aromáticos e Olefínicos podem ser apenas informados.

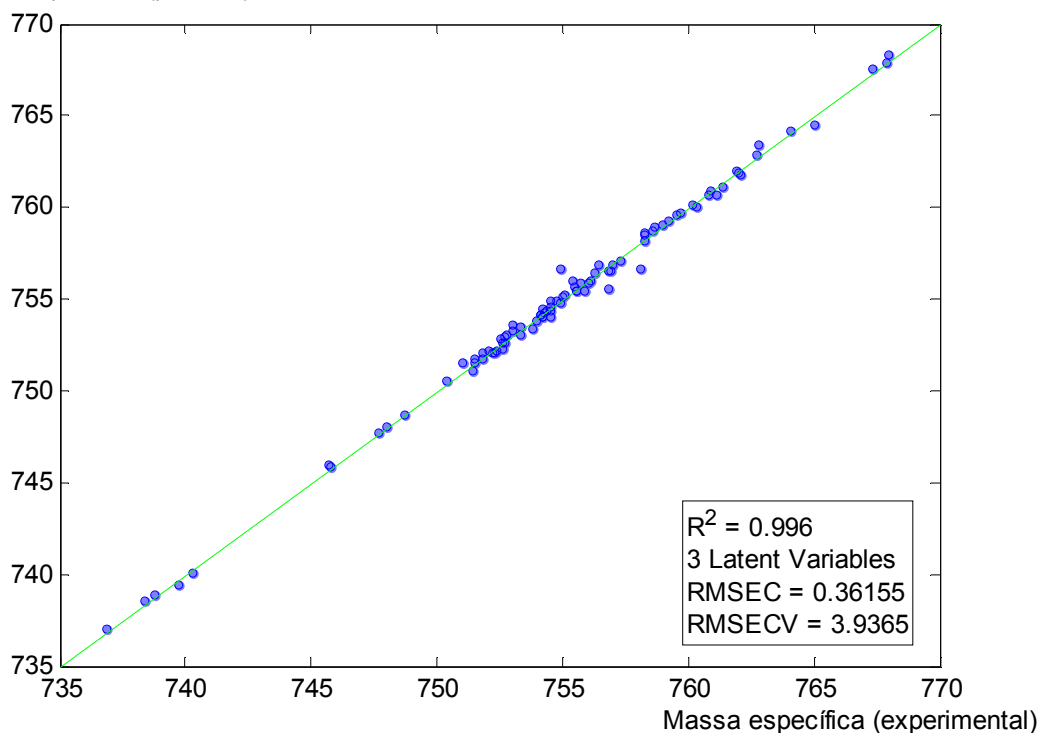
APÊNDICE B – MODELAGEM PLS E PCR

1 INFORMAÇÕES DE CADA MODELO

1.1 MASSA ESPECÍFICA (kg/m³)

PLS

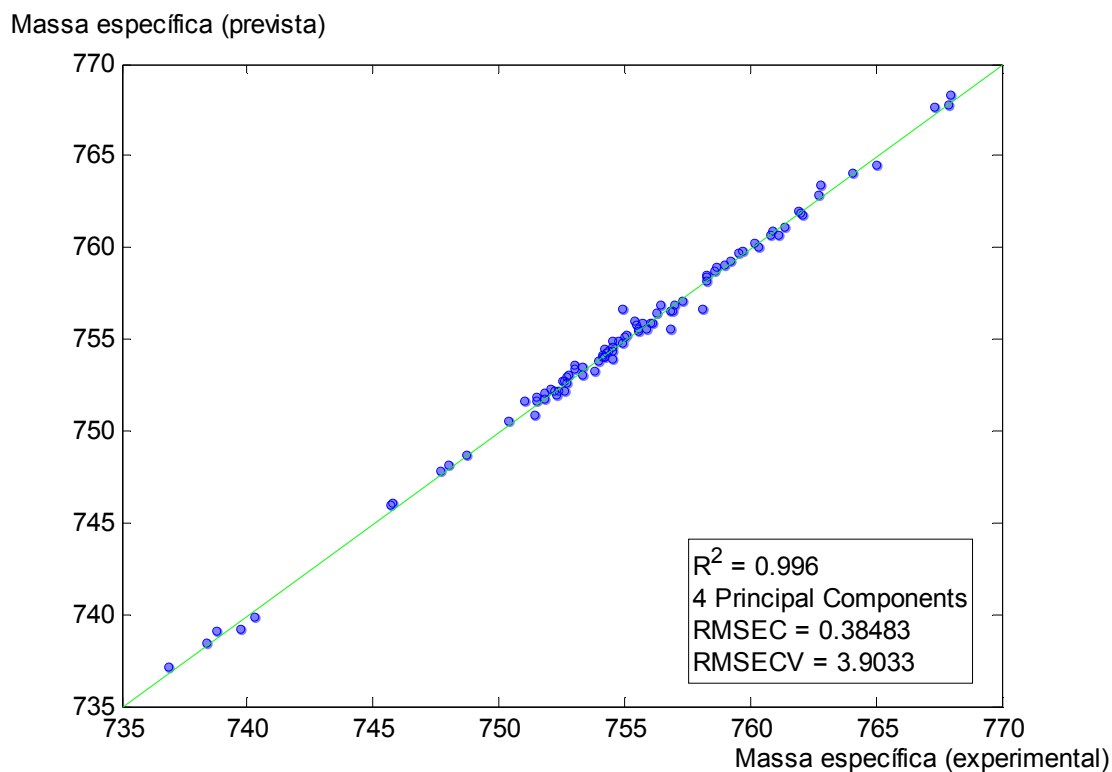
Massa específica (previsto)



Pré-trat, X	Pré-trat, Y	Nº amostras treinamento	Nº amostras teste	Nº variáveis latentes	Cross-validation
Autoesc, 2ª deriv ordem 2 15 pt., Alisam, 15 pt., OSC	Autoesc	90	38	3	Venetian blind 9 splits

Porcentagem capturada pelo modelo

Componente	Bloco X		Bloco Y	
	Contribuição do componente	Total	Contribuição do componente	Total
1	34,59	34,59	96,72	96,72
2	27,95	62,54	2,61	99,33
3	10,89	73,43	0,29	99,62

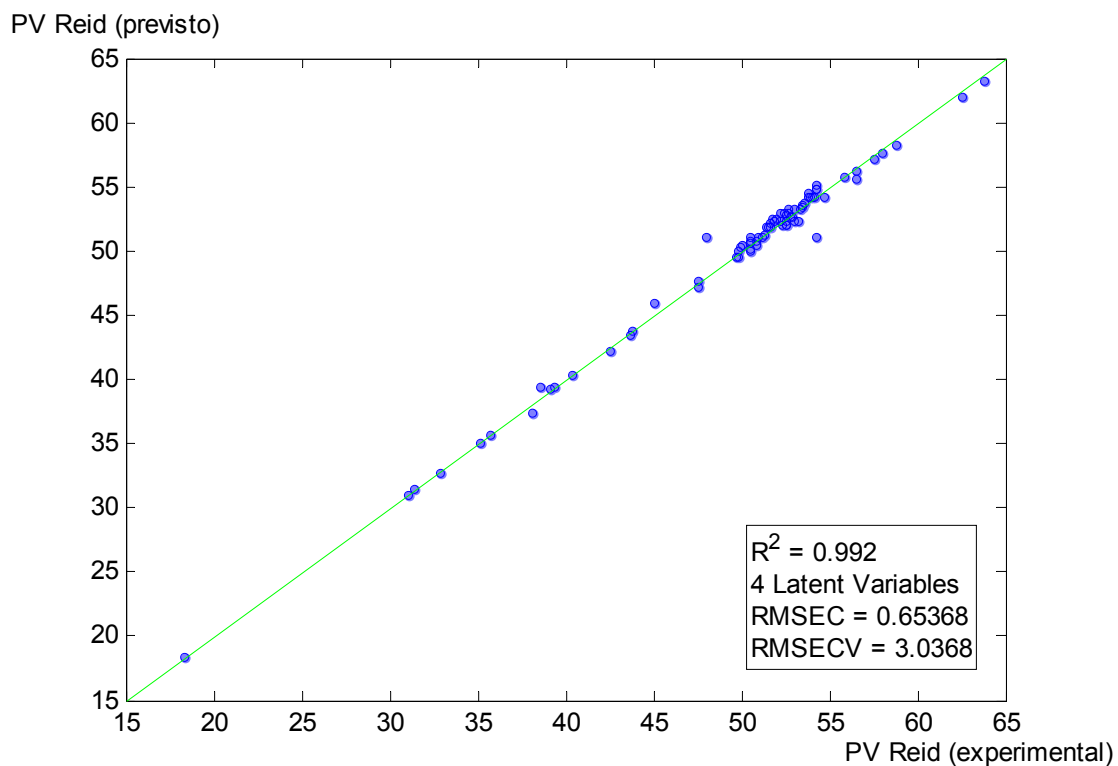
PCR

Pré-trat, X	Pré-trat, Y	N° amostras treinamento	N° amostras teste	N° componentes principais	Cross-validation
Autoesc, 2ª deriv ordem 2 15 pt., Alisam, 15 pt., OSC	Autoesc	90	38	4	Venetian blind 9 splits

Porcentagem capturada pelo modelo

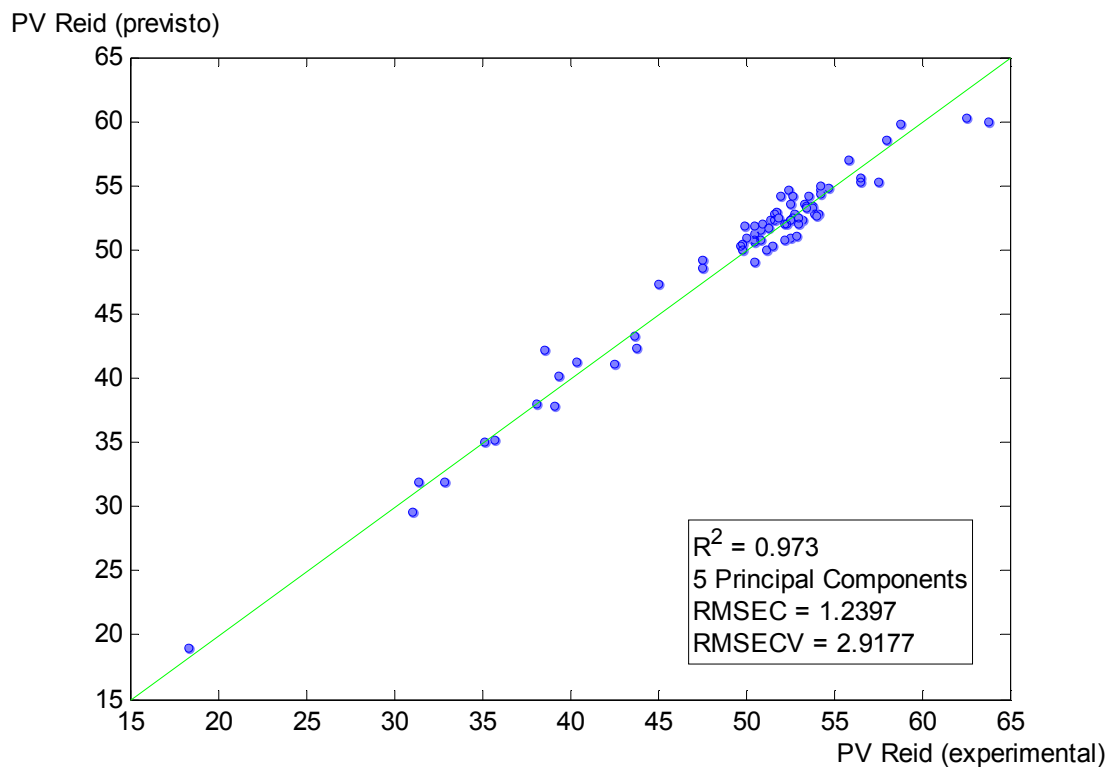
Componente	Bloco X		Bloco Y	
	Contribuição do componente	Total	Contribuição do componente	Total
1	36,88	36,88	63,94	63,94
2	26,39	63,27	34,20	98,14
3	14,02	77,29	0,15	98,29
4	9,92	87,22	1,29	99,57

1.2 PRESSÃO DE VAPOR REID (kPa)

PLS

Pré-trat, X	Pré-trat, Y	Nº amostras treinamento	Nº amostras teste	Nº variáveis latentes	Cross-validation
Autoesc, 2ª deriv ordem 2 15 pt., Alisam, 15 pt., OSC	Autoesc	77	29	4	Venetian blind 8 splits

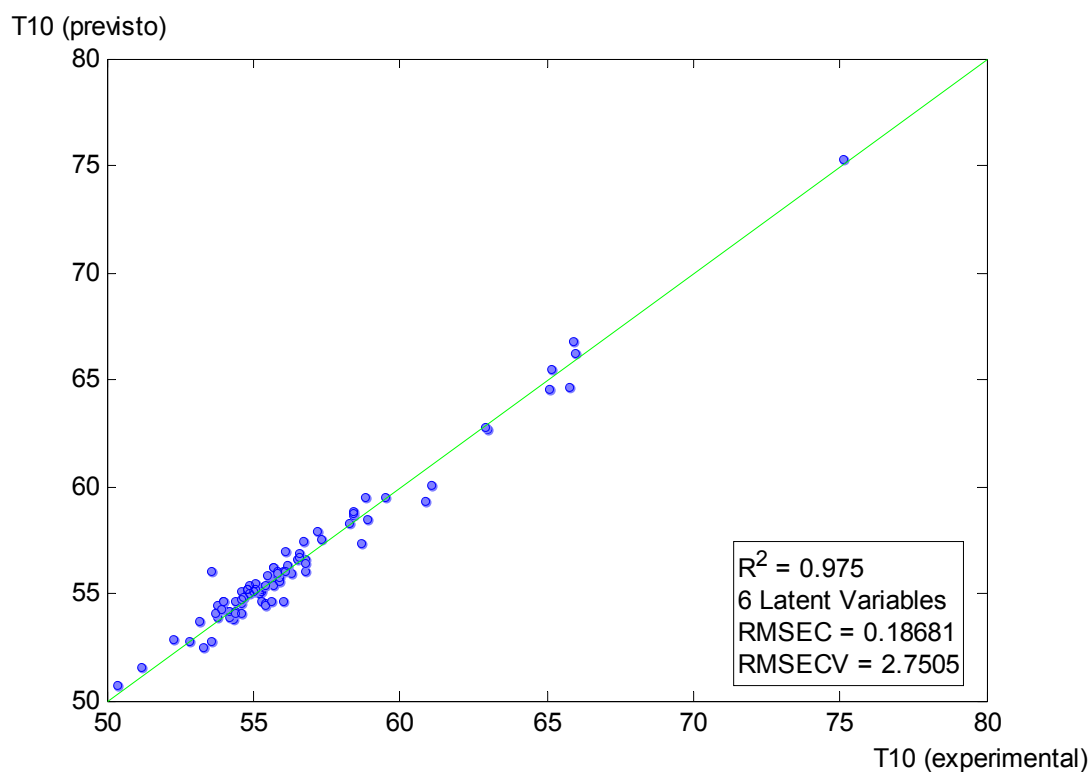
Porcentagem capturada pelo modelo				
Componente	Bloco X		Bloco Y	
	Contribuição do componente	Total	Contribuição do componente	Total
1	35,88	35,88	81,19	81,19
2	26,60	62,48	12,43	93,62
3	11,36	73,84	4,49	98,11
4	4,26	78,10	1,11	99,22

PCR

Pré-trat, X	Pré-trat, Y	N° amostras treinamento	N° amostras teste	N° componentes principais	Cross-validation
Autoesc, 2ª deriv ordem 2 15 pt., Alisam, 15 pt., OSC	Autoesc	76	29	4	Venetian blind 8 splits

Porcentagem capturada pelo modelo

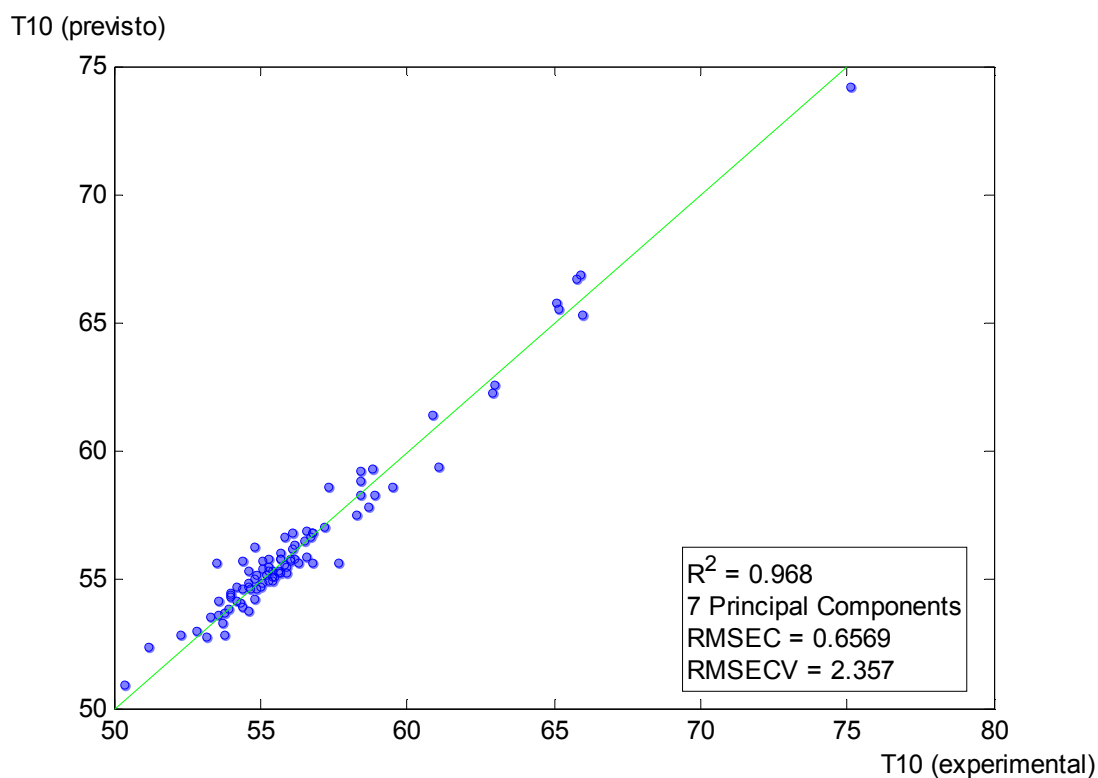
Componente	Bloco X		Bloco Y	
	Contribuição do componente	Total	Contribuição do componente	Total
1	40,87	40,87	31,08	31,08
2	22,69	63,56	48,86	79,94
3	11,72	75,29	1,35	81,29
4	9,71	84,99	15,78	97,06

2.3 CURVA DE DESTILAÇÃO – T₁₀ (°C)PLS

Pré-trat, X	Pré-trat, Y	N° amostras treinamento	N° amostras teste	N° variáveis latentes	Cross-validation
Autoesc, 2ª deriv ordem 2 15 pt., Alisam, 15 pt., OSC	Autoesc	88	38	6	Venetian blind 9 splits

Porcentagem capturada pelo modelo

Componente	Bloco X		Bloco Y	
	Contribuição do componente	Total	Contribuição do componente	Total
1	31,15	31,15	71,53	71,53
2	26,77	57,92	11,34	82,87
3	15,19	73,11	6,85	89,72
4	11,80	84,91	1,63	91,35
5	2,9	87,81	4,39	95,74
6	1,35	89,16	1,79	97,53

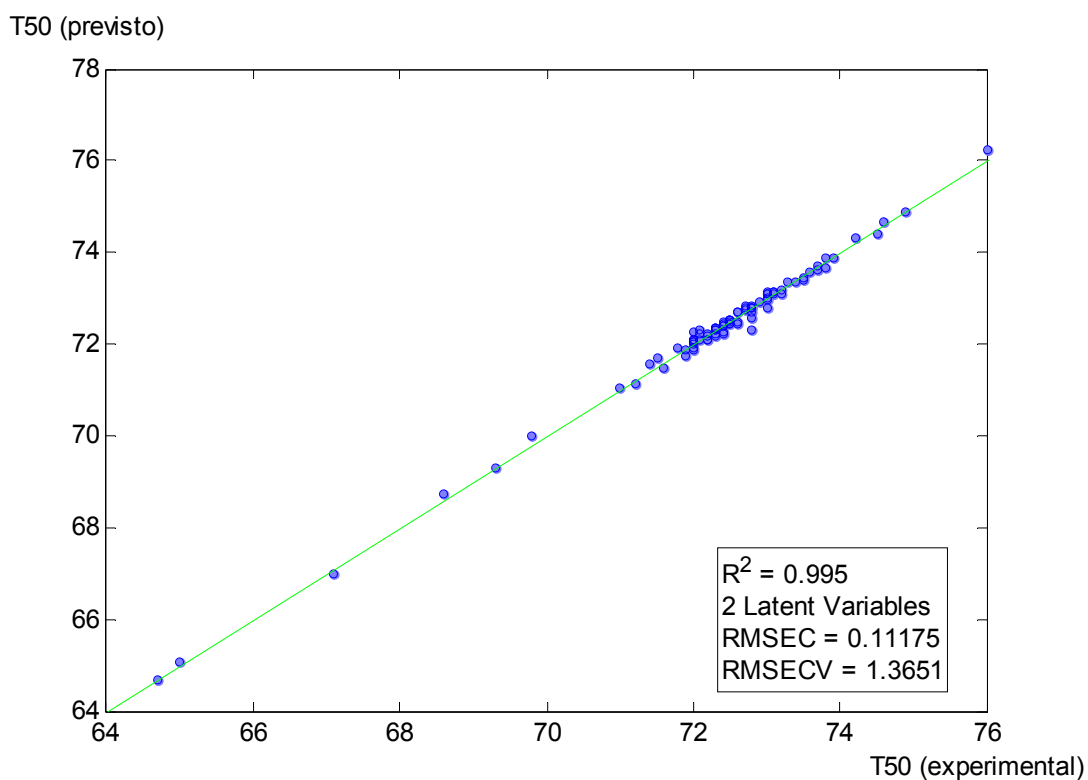
PCR

Pré-trat, X	Pré-trat, Y	N° amostras treinamento	N° amostras teste	N° componentes principais	Cross-validation
Autoesc, 2ª deriv ordem 2 15 pt., Alisam, 15 pt., OSC	Autoesc	90	38	7	Venetian blind 9 splits

Porcentagem capturada pelo modelo

Componente	Bloco X		Bloco Y	
	Contribuição do componente	Total	Contribuição do componente	Total
1	41,96	41,96	9,94	9,94
2	20,66	62,63	42,34	52,28
3	14,84	77,47	0,22	52,50
4	8,05	85,51	40,63	93,12
5	3,72	89,24	0,07	93,19
6	2,47	91,71	0,90	94,09
7	1,99	93,70	2,69	96,78

2.4 CURVA DE DESTILAÇÃO – T₅₀ (°C)

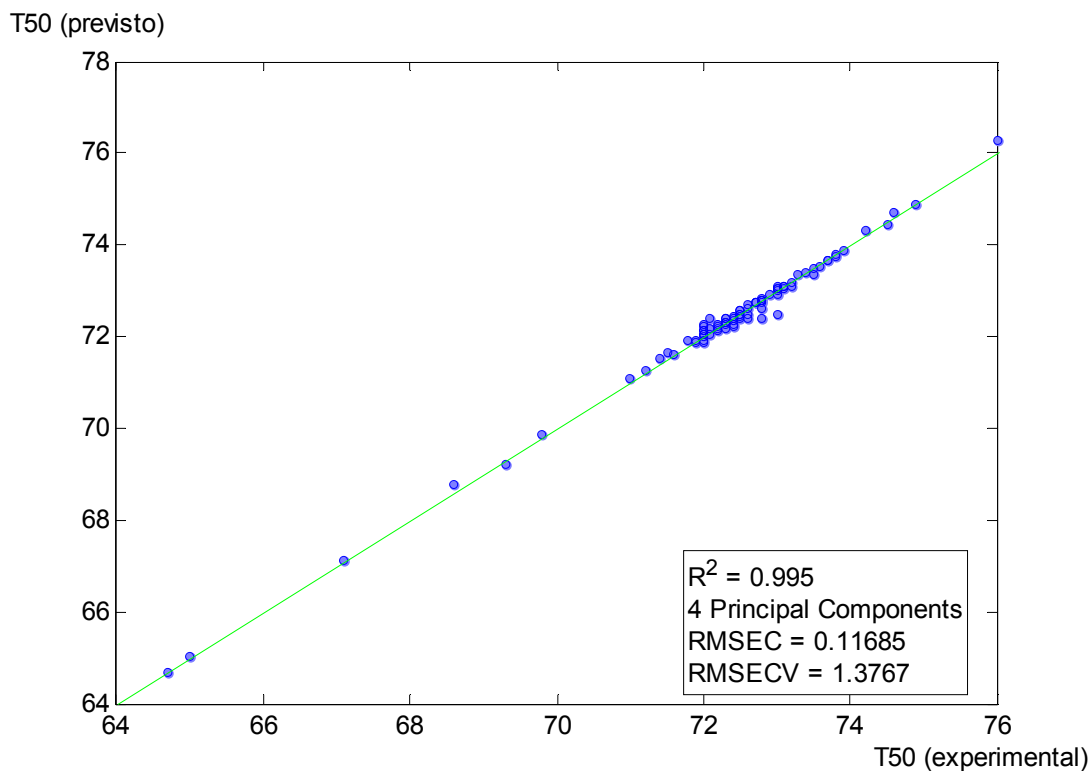
PLS

Pré-trat, X	Pré-trat, Y	N° amostras treinamento	N° amostras teste	N° variáveis latentes	Cross-validation
Autoesc, 2ª deriv ordem 2 15 pt., Alisam, 15 pt., OSC	Autoesc	90	38	2	Venetian blind 9 splits

Porcentagem capturada pelo modelo

Componente	Bloco X		Bloco Y	
	Contribuição do componente	Total	Contribuição do componente	Total
1	31,11	31,11	97,66	97,66
2	11,42	42,53	1,86	99,52

PCR

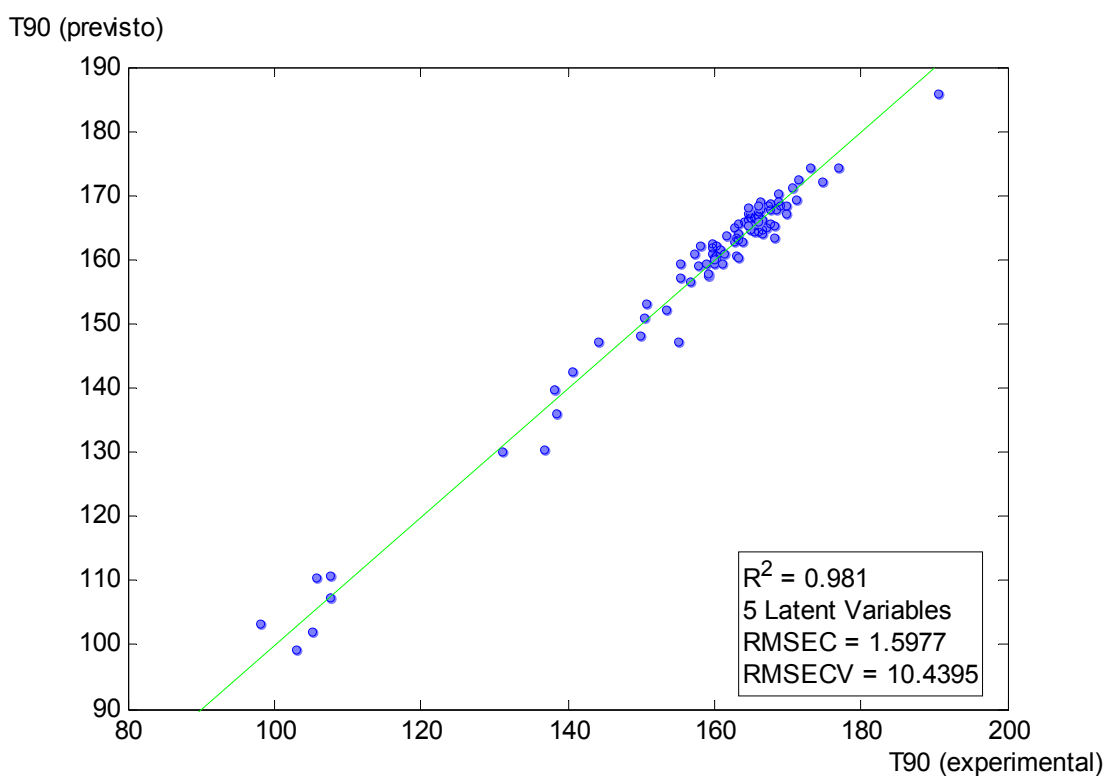


Pré-trat, X	Pré-trat, Y	N° amostras treinamento	N° amostras teste	N° componentes principais	Cross-validation
Autoesc, 2ª deriv ordem 2 15 pt., Alisam, 15 pt., OSC	Autoesc	90	38	4	Venetian blind 9 splits

Porcentagem capturada pelo modelo

Componente	Bloco X		Bloco Y	
	Contribuição do componente	Total	Contribuição do componente	Total
1	33,28	33,28	2,20	2,20
2	31,14	64,41	93,44	95,63
3	13,69	78,10	0,74	96,37
4	8,57	86,67	3,10	99,48

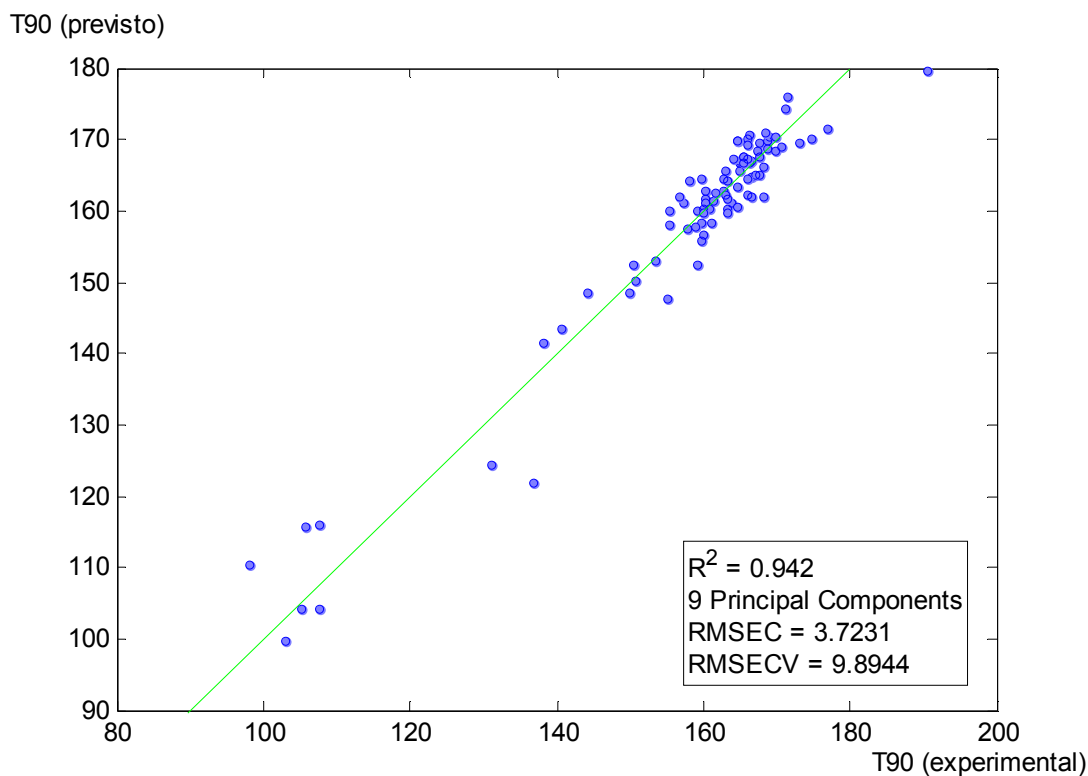
2.5 CURVA DE DESTILAÇÃO – T₉₀ (°C)

PLS

Pré-trat, X	Pré-trat, Y	Nº amostras treinamento	Nº amostras teste	Nº variáveis latentes	Cross-validation
Autoesc, 2ª deriv ordem 2 15 pt., Alisam, 15 pt., OSC	Autoesc	89	38	5	Venetian blind 9 splits

Porcentagem capturada pelo modelo

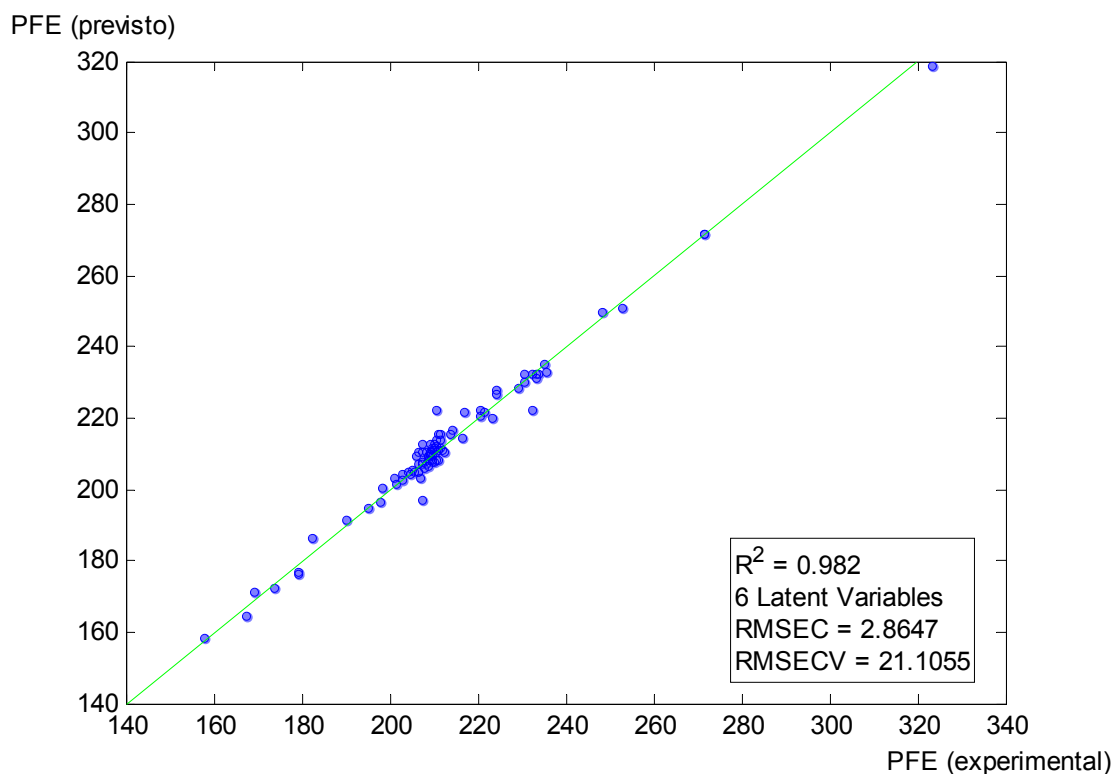
Componente	Bloco X		Bloco Y	
	Contribuição do componente	Total	Contribuição do componente	Total
1	32,38	32,38	72,66	72,66
2	29,82	62,20	11,65	84,30
3	5,25	67,44	10,11	94,41
4	14,38	81,82	1,70	96,10
5	2,67	84,49	1,98	98,09

PCR

Pré-trat, X	Pré-trat, Y	N° amostras treinamento	N° amostras teste	N° componentes principais	Cross-validation
Autoesc, 2ª deriv ordem 2 15 pt., Alisam, 15 pt., OSC	Autoesc	88	38	9	Venetian blind 8 splits

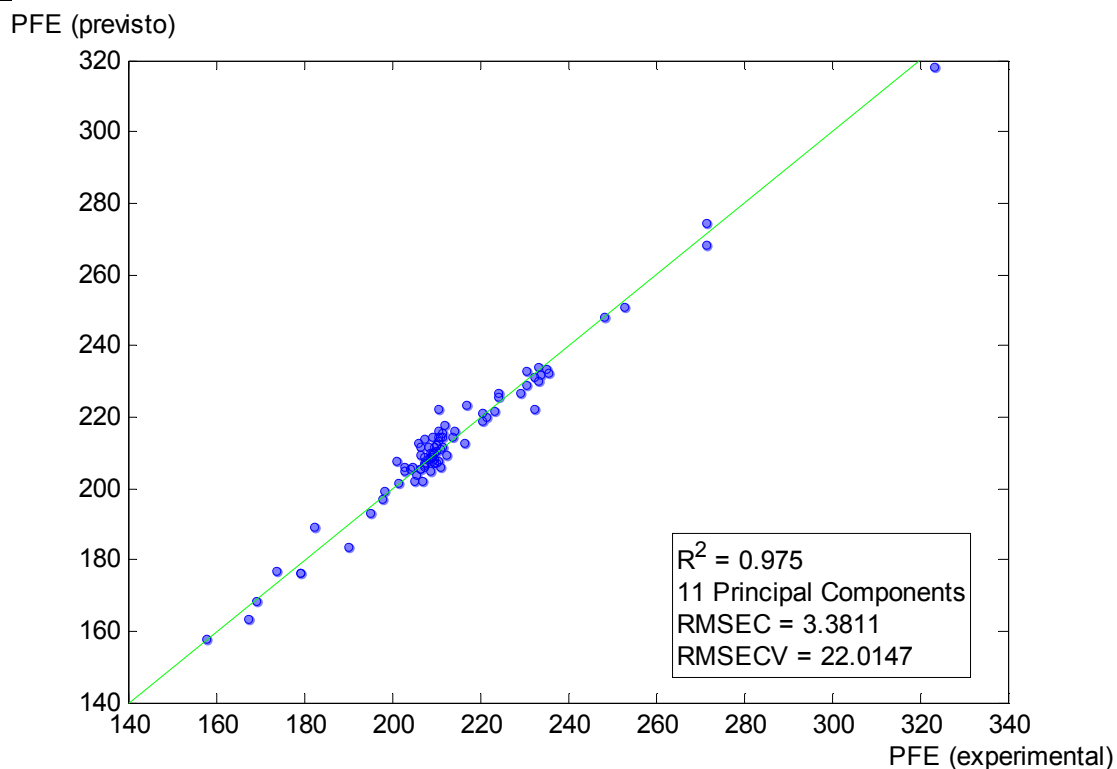
Porcentagem capturada pelo modelo

Componente	Bloco X		Bloco Y	
	Contribuição do componente	Total	Contribuição do componente	Total
1	43,94	43,94	18,71	18,71
2	20,98	64,91	48,78	67,48
3	16,01	80,93	13,12	80,60
4	4,71	85,63	0,02	80,62
5	3,42	89,05	0,28	80,89
6	2,20	91,25	5,69	86,58
7	1,93	93,18	5,35	91,94
8	1,37	94,56	0,10	92,04
9	1,02	95,57	2,17	94,21

2.6 CURVA DE DESTILAÇÃO – T_{PFE} (°C)PLS

Pré-trat, X	Pré-trat, Y	N° amostras treinamento	N° amostras teste	N° variáveis latentes	Cross-validation
Autoesc, 2ª deriv ordem 2 15 pt., Alisam, 15 pt., OSC	Autoesc	90	38	6	Venetian blind 9 splits

Porcentagem capturada pelo modelo				
Componente	Bloco X		Bloco Y	
	Contribuição do componente	Total	Contribuição do componente	Total
1	18,91	18,91	29,28	29,28
2	5,31	24,23	44,50	73,79
3	31,92	56,15	6,85	80,64
4	22,50	78,65	7,03	87,66
5	7,16	85,81	8,06	95,73
6	2,76	88,57	2,46	98,19

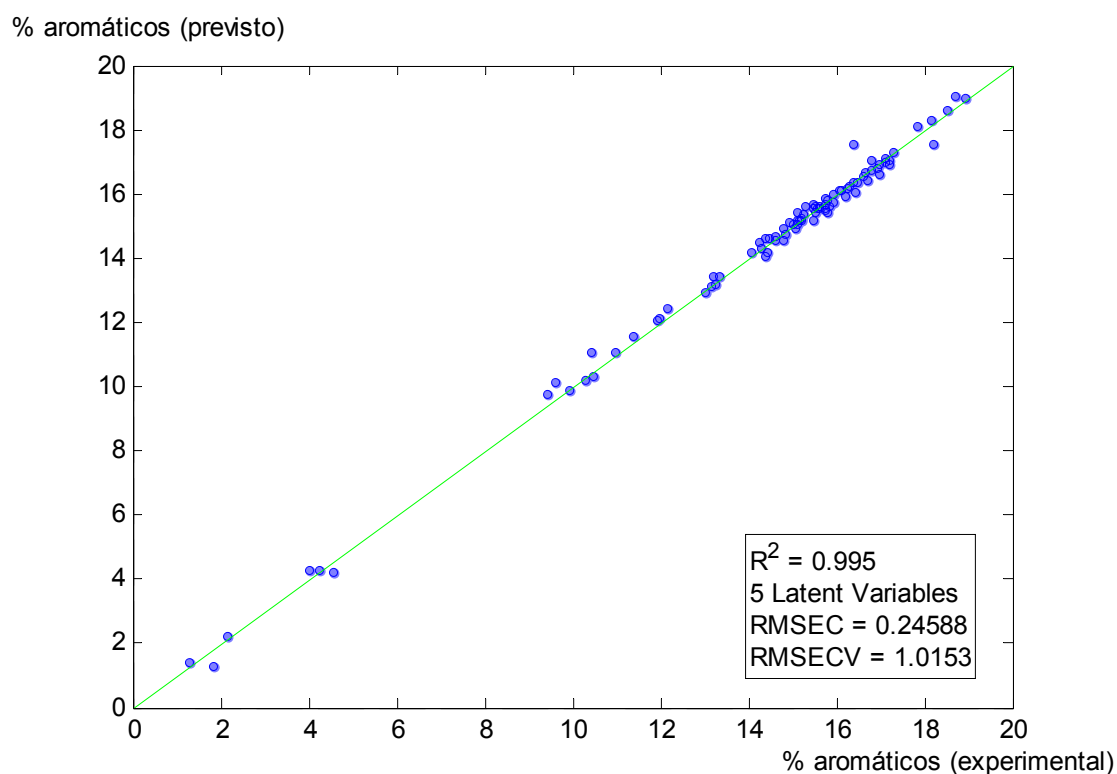
PCR

Pré-trat, X	Pré-trat, Y	N° amostras treinamento	N° amostras teste	N° componentes principais	Cross-validation
Autoesc, 2ª deriv ordem 2 15 pt., Alisam, 15 pt., OSC	Autoesc	90	38	11	<i>Venetian blind 9 splits</i>

Porcentagem capturada pelo modelo

Componente	Bloco X		Bloco Y	
	Contribuição do componente	Total	Contribuição do componente	Total
1	44,36	44,36	0,00	0,00
2	19,83	64,19	14,40	14,41
3	15,82	80,01	1,57	15,97
4	5,00	85,02	3,60	19,57
5	3,97	88,99	2,23	21,80
6	2,59	91,58	6,24	28,05
7	1,75	93,33	7,79	35,84
8	1,35	94,68	15,46	51,30
9	0,94	95,62	31,69	82,99
10	0,85	96,46	10,66	93,65
11	0,70	97,16	3,83	97,48

2.7 TEOR DE AROMÁTICOS (% v/v)

PLS

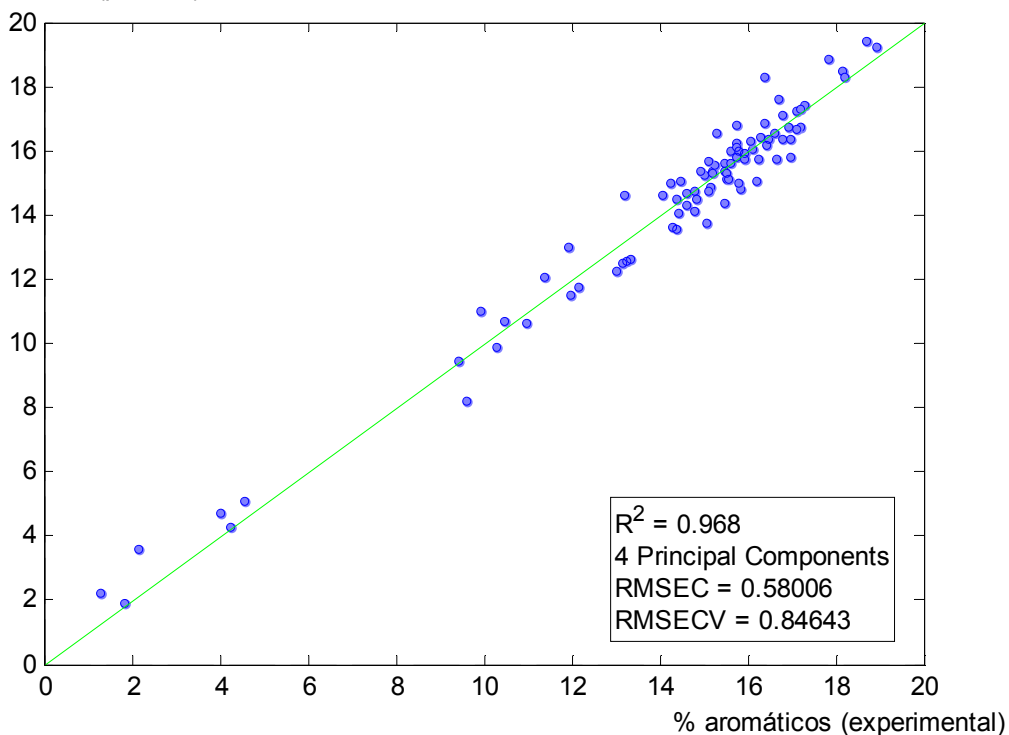
Pré-trat, X	Pré-trat, Y	N° amostras treinamento	N° amostras teste	N° variáveis latentes	Cross-validation
Autoesc, 2ª deriv ordem 2 15 pt., Alisam, 15 pt., OSC	Autoesc	90	38	5	Venetian blind 9 splits

Porcentagem capturada pelo modelo

Componente	Bloco X		Bloco Y	
	Contribuição do componente	Total	Contribuição do componente	Total
1	36,29	36,29	85,84	84,84
2	29,44	65,73	9,59	95,43
3	11,73	77,46	1,31	96,74
4	6,91	84,37	1,57	98,31
5	2,47	86,84	1,23	99,54

PCR

% aromáticos (previsto)

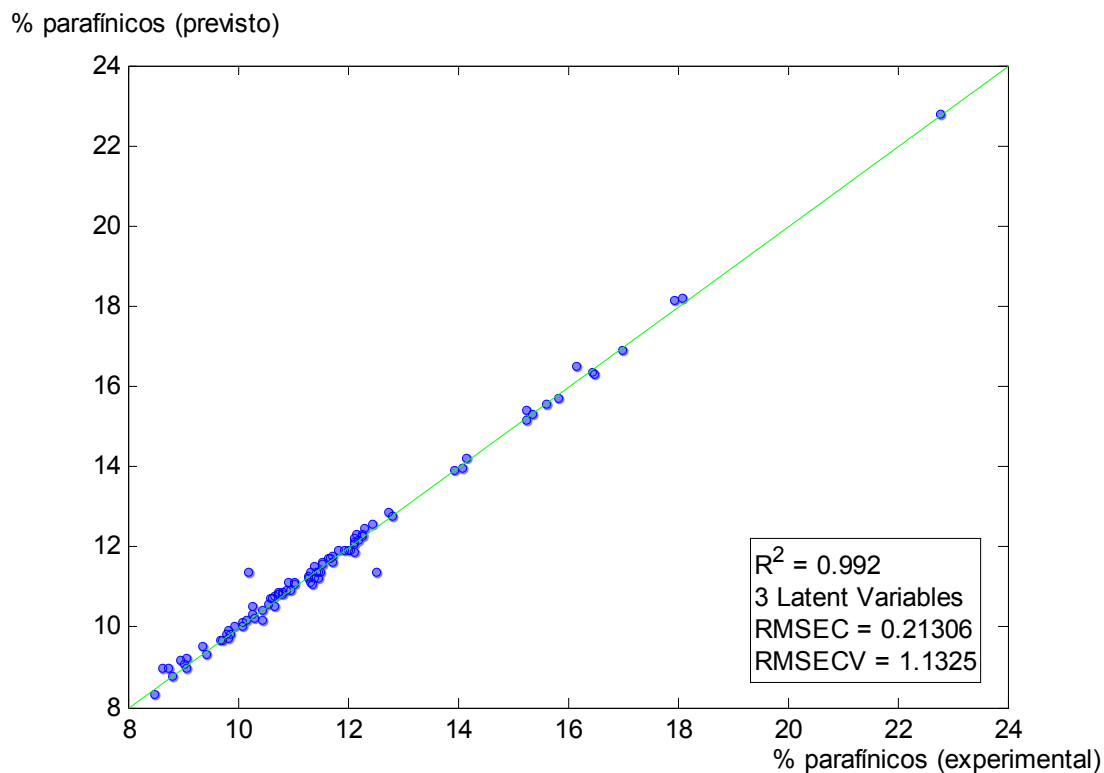


Pré-trat, X	Pré-trat, Y	N° amostras treinamento	N° amostras teste	N° componentes principais	Cross-validation
Autoesc, 2ª deriv ordem 2 15 pt., Alisam, 15 pt., OSC	Autoesc	87	38	4	Venetian blind 9 splits

Porcentagem capturada pelo modelo

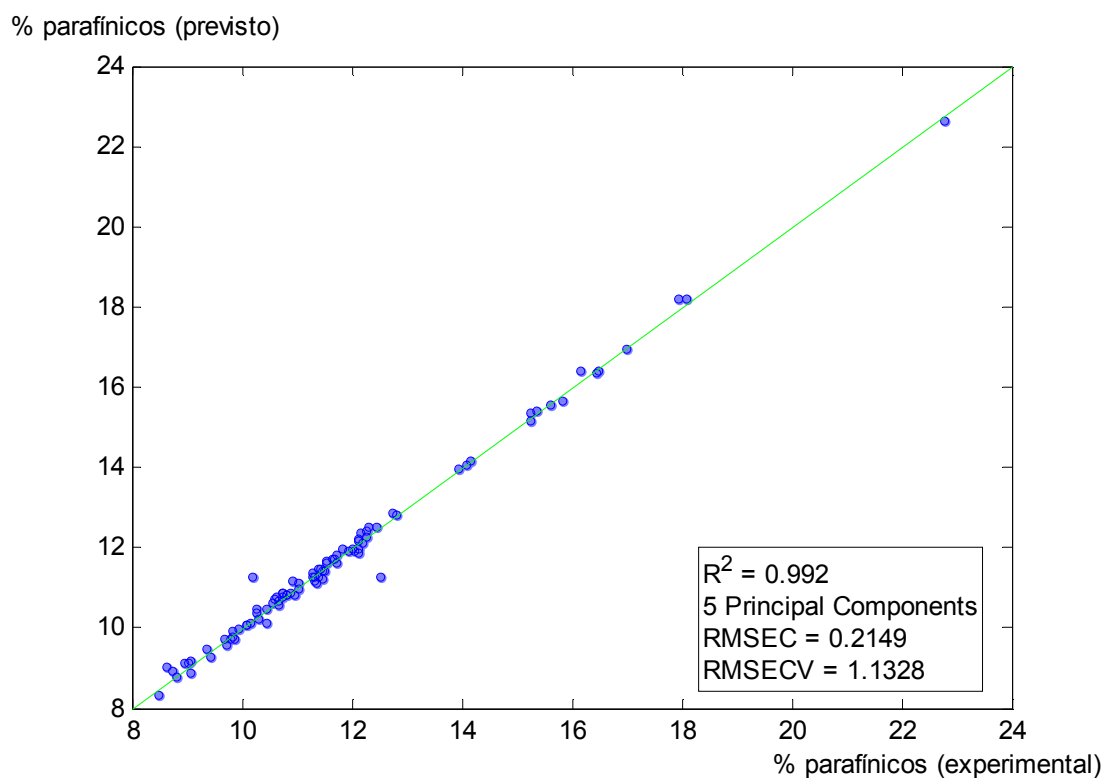
Componente	Bloco X		Bloco Y	
	Contribuição do componente	Total	Contribuição do componente	Total
1	42,72	42,72	42,09	42,09
2	25,21	67,93	52,11	94,21
3	15,01	82,93	1,34	95,55
4	4,05	86,99	1,22	96,77

2.8 TEOR DE PARAFÍNICOS(% v/v)

PLS

Pré-trat, X	Pré-trat, Y	N° amostras treinamento	N° amostras teste	N° variáveis latentes	Cross-validation
Autoesc, 2ª deriv ordem 2 15 pt., Alisam, 15 pt., OSC	Autoesc	90	38	3	Venetian blind 9 splits

Porcentagem capturada pelo modelo				
Componente	Bloco X		Bloco Y	
	Contribuição do componente	Total	Contribuição do componente	Total
1	36,16	36,16	92,87	92,87
2	26,57	62,73	5,49	98,36
3	11,29	74,02	0,86	99,22

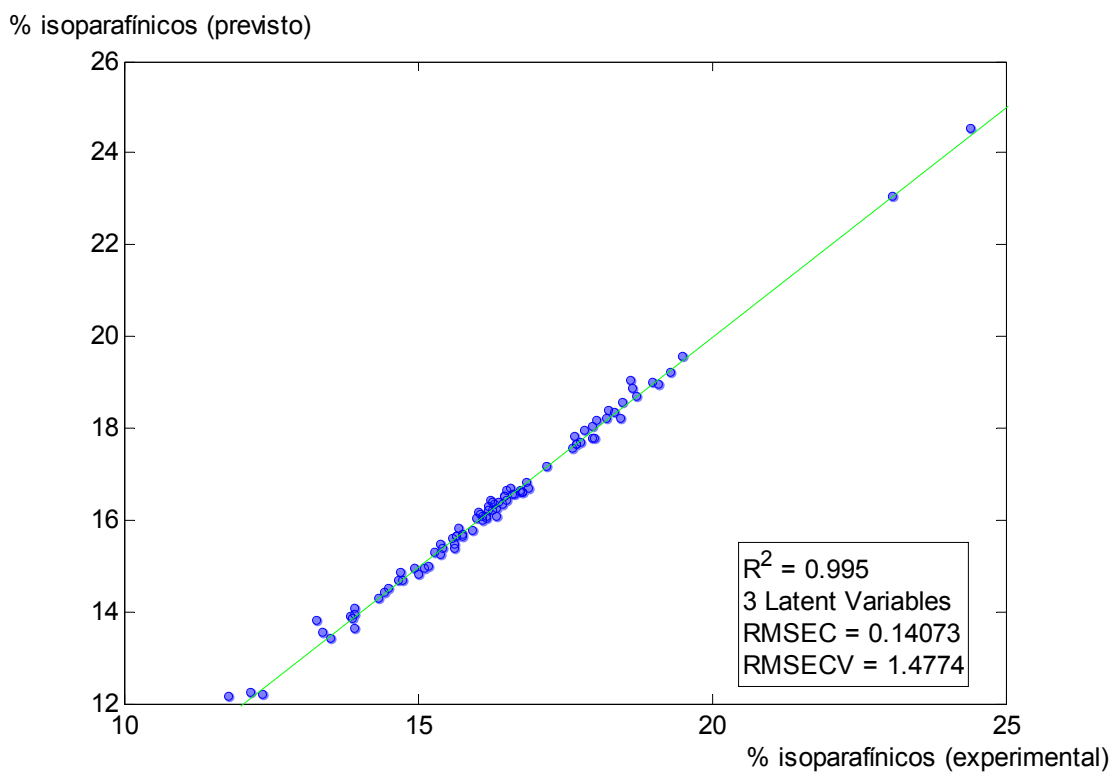
PCR

Pré-trat, X	Pré-trat, Y	Nº amostras treinamento	Nº amostras teste	Nº componentes principais	Cross-validation
Autoesc, 2ª deriv ordem 2 15 pt., Alisam, 15 pt., OSC	Autoesc	90	38	5	Venetian blind 9 splits

Porcentagem capturada pelo modelo

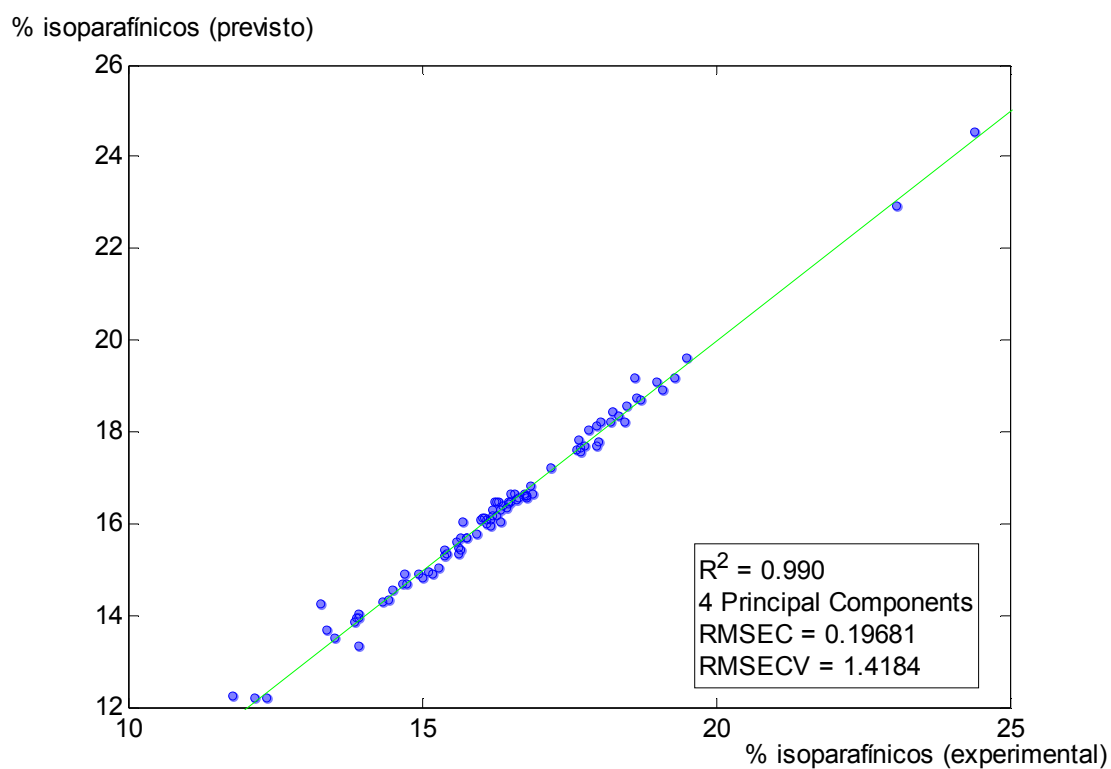
Componente	Bloco X		Bloco Y	
	Contribuição do componente	Total	Contribuição do componente	Total
1	39,22	39,22	57,67	57,67
2	24,74	63,95	36,89	94,56
3	14,06	78,01	1,08	95,64
4	9,26	87,27	3,45	99,09
5	3,20	90,47	0,11	99,21

2.9 TEOR DE ISOPARAFÍNICOS(% v/v)

PLS

Pré-trat, X	Pré-trat, Y	N° amostras treinamento	N° amostras teste	N° variáveis latentes	Cross-validation
Autoesc, 2ª deriv ordem 2 15 pt., Alisam, 15 pt., OSC	Autoesc	90	38	3	Venetian blind 9 splits

Porcentagem capturada pelo modelo				
Componente	Bloco X		Bloco Y	
	Contribuição do componente	Total	Contribuição do componente	Total
1	31,36	31,36	90,57	90,57
2	29,42	60,78	6,63	97,21
3	11,93	72,71	2,28	99,49

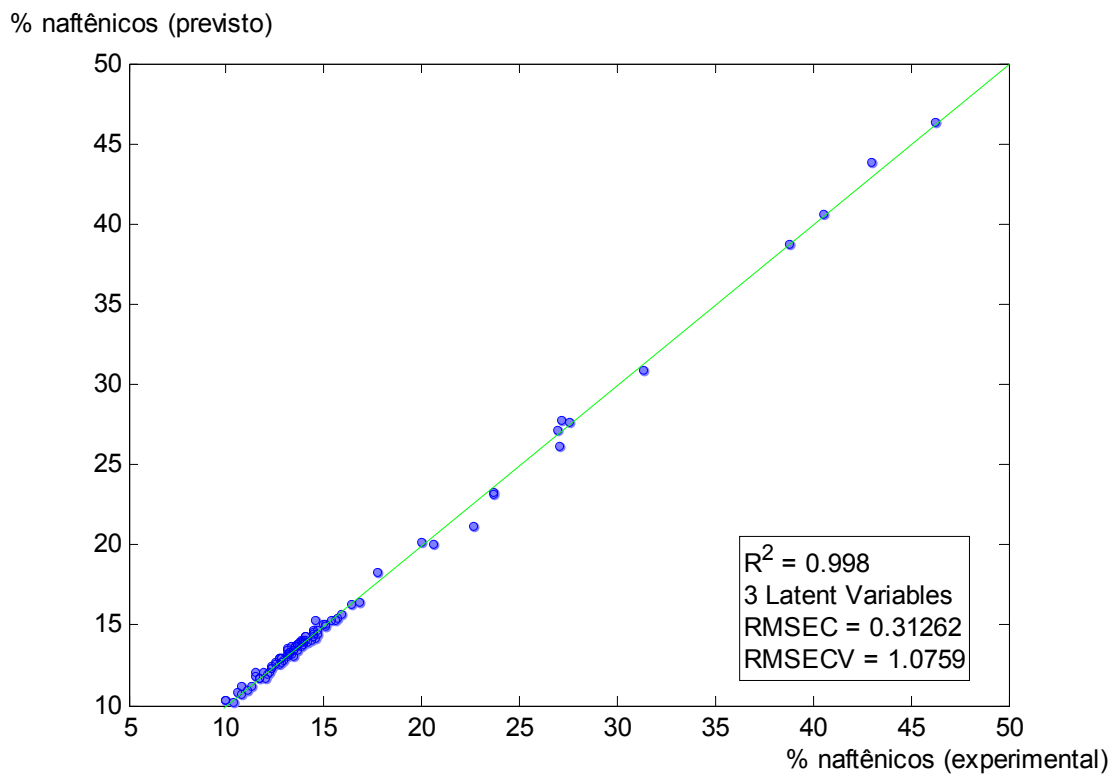
PCR

Pré-trat, X	Pré-trat, Y	N° amostras treinamento	N° amostras teste	N° componentes principais	Cross-validation
Autoesc, 2ª deriv ordem 2 15 pt., Alisam, 15 pt., OSC	Autoesc	90	38	4	Venetian blind 9 splits

Porcentagem capturada pelo modelo

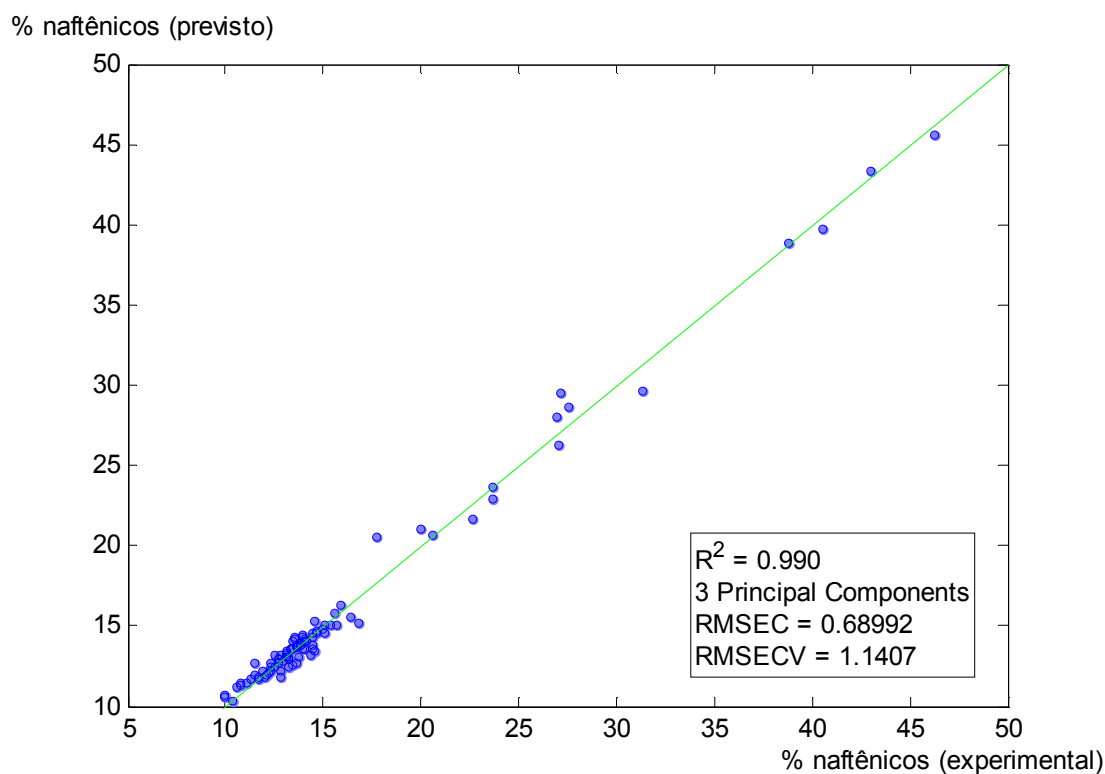
Componente	Bloco X		Bloco Y	
	Contribuição do componente	Total	Contribuição do componente	Total
1	38,15	38,15	26,64	26,64
2	25,18	63,32	61,49	88,12
3	13,71	77,04	1,53	89,65
4	8,99	86,02	9,36	99,01

2.10 TEOR DE NAFTÊNICOS (% v/v)

PLS

Pré-trat, X	Pré-trat, Y	N° amostras treinamento	N° amostras teste	N° variáveis latentes	Cross-validation
Autoesc, 2ª deriv ordem 2 15 pt., Alisam, 15 pt., OSC	Autoesc	90	38	3	Venetian blind 9 splits

Porcentagem capturada pelo modelo				
Componente	Bloco X		Bloco Y	
	Contribuição do componente	Total	Contribuição do componente	Total
1	43,96	43,96	97,16	97,16
2	27,42	71,39	2,14	99,30
3	5,90	77,29	0,50	99,80

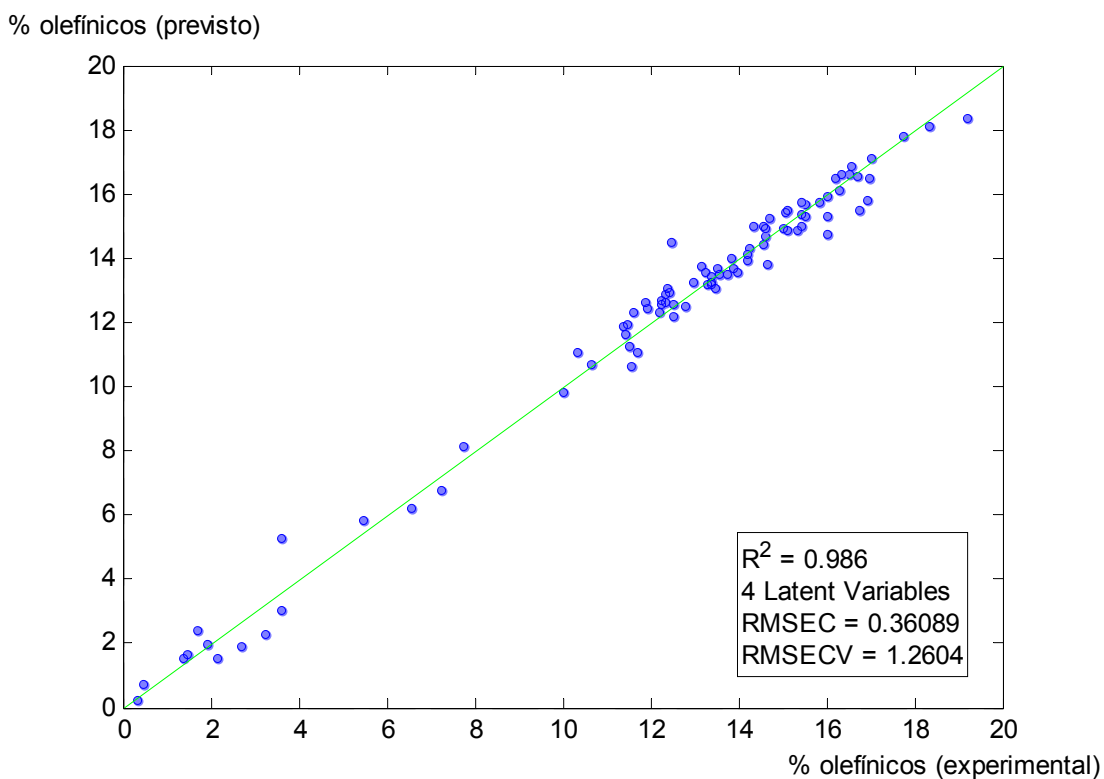
PCR

Pré-trat, X	Pré-trat, Y	N° amostras treinamento	N° amostras teste	N° componentes principais	Cross-validation
Autoesc, 2ª deriv ordem 2 15 pt., Alisam, 15 pt., OSC	Autoesc	90	38	3	Venetian blind 9 splits

Porcentagem capturada pelo modelo

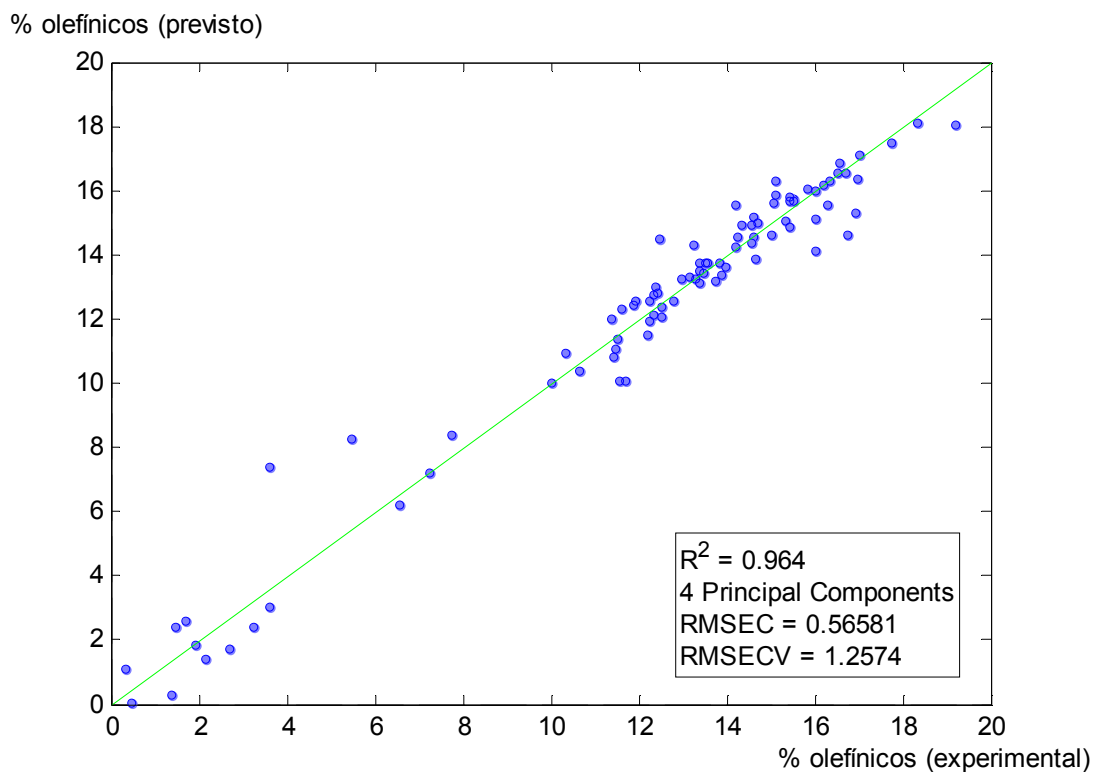
Componente	Bloco X		Bloco Y	
	Contribuição do componente	Total	Contribuição do componente	Total
1	44,85	44,85	86,41	86,41
2	26,72	71,57	12,53	98,95
3	12,33	83,90	0,08	99,03

2.11 TEOR DE OLEFÍNICOS(% v/v)

PLS

Pré-trat, X	Pré-trat, Y	Nº amostras treinamento	Nº amostras teste	Nº variáveis latentes	Cross-validation
Autoesc, 2ª deriv ordem 2 15 pt., Alisam, 15 pt., OSC	Autoesc	89	38	4	Venetian blind 9 splits

Porcentagem capturada pelo modelo				
Componente	Bloco X		Bloco Y	
	Contribuição do componente	Total	Contribuição do componente	Total
1	36,38	36,38	90,77	90,77
2	29,75	66,14	4,50	95,27
3	6,61	72,75	2,67	97,94
4	9,71	82,46	0,65	98,59

PCR

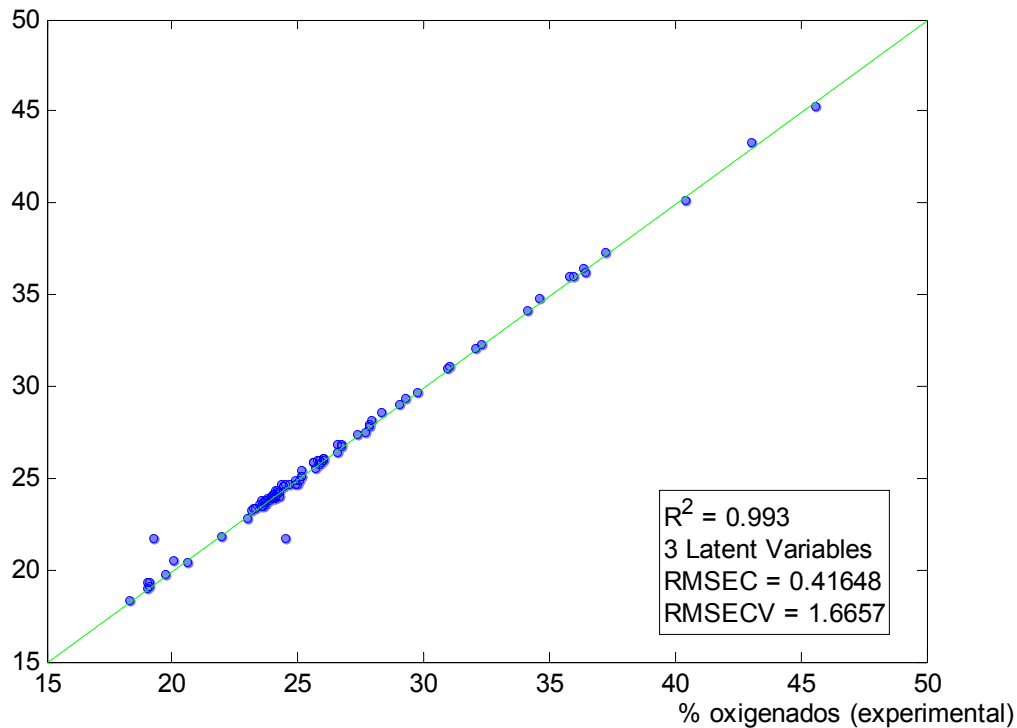
Pré-trat, X	Pré-trat, Y	N° amostras treinamento	N° amostras teste	N° componentes principais	Cross-validation
Autoesc, 2ª deriv ordem 2 15 pt., Alisam, 15 pt., OSC	Autoesc	89	38	4	Venetian blind 9 splits

Porcentagem capturada pelo modelo				
Componente	Bloco X		Bloco Y	
	Contribuição do componente	Total	Contribuição do componente	Total
1	39,97	39,97	50,72	50,72
2	27,01	66,98	41,78	92,50
3	14,32	81,30	0,10	92,61
4	5,84	87,14	3,82	96,43

2.12 TEOR DE OXIGENADOS (% v/v)

PLS

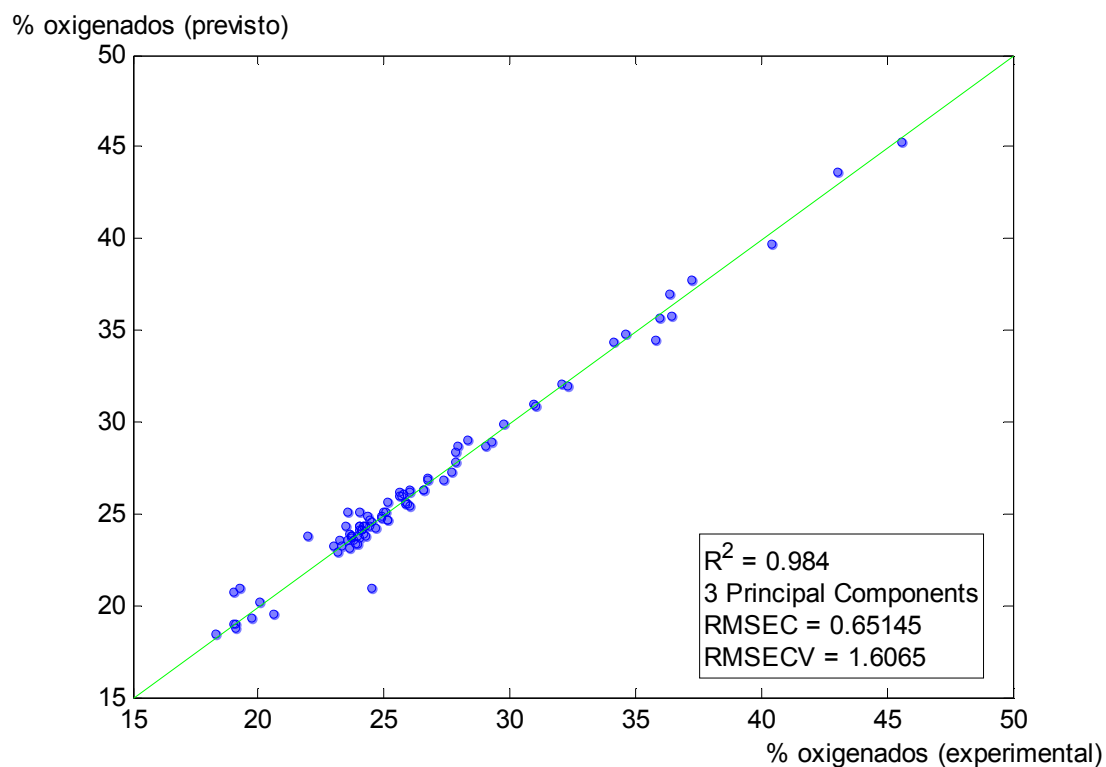
% oxigenados (previsto)



Pré-trat, X	Pré-trat, Y	N° amostras treinamento	N° amostras teste	N° variáveis latentes	Cross-validation
Autoesc, 2ª deriv ordem 2 15 pt., Alisam, 15 pt., OSC	Autoesc	90	38	3	Venetian blind 9 splits

Porcentagem capturada pelo modelo

Componente	Bloco X		Bloco Y	
	Contribuição do componente	Total	Contribuição do componente	Total
1	43,52	43,52	97,86	97,86
2	26,59	70,11	1,06	98,92
3	7,82	77,94	0,41	99,33

PCR

Pré-trat, X	Pré-trat, Y	N° amostras treinamento	N° amostras teste	N° componentes principais	Cross-validation
Autoesc, 2ª deriv ordem 2 15 pt., Alisam, 15 pt., OSC	Autoesc	90	38	3	Venetian blind 9 splits

Porcentagem capturada pelo modelo

Componente	Bloco X		Bloco Y	
	Contribuição do componente	Total	Contribuição do componente	Total
1	43,89	43,89	93,06	93,06
2	27,32	71,21	5,25	98,31
3	11,06	82,27	0,05	98,36

APÊNDICE C – TABELAS DE DESVIOS RELATIVOS – TREINAMENTO

1 MASSA ESPECÍFICA (kg/m³)

TABELA 1 – DESVIOS DE TREINAMENTO PLS E PCR

Amostra	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	Valor previsto PCR (%)	CONTINUA	
						Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GC25	752,7	752,9	0,2	0,03	752,9	0,2	0,03
GC59	736,9	737,1	0,2	0,03	737,1	0,2	0,03
GC34	754,1	754,1	0,0	-0,01	754,1	0,0	-0,01
GC26	755,0	755,1	0,1	0,01	755,1	0,1	0,01
GA13	761,1	760,6	-0,5	-0,06	760,6	-0,5	-0,06
GC28	760,2	760,2	0,0	0,01	760,2	0,0	0,01
GC16	754,5	754,9	0,4	0,05	754,9	0,4	0,05
GA01	755,1	755,2	0,1	0,02	755,2	0,1	0,02
GC10	754,2	754,0	-0,2	-0,03	754,0	-0,2	-0,03
GC35	754,0	753,8	-0,2	-0,03	753,8	-0,2	-0,03
GC03	754,5	754,0	-0,5	-0,07	754,0	-0,5	-0,07
GC79	758,1	756,7	-1,4	-0,19	756,7	-1,4	-0,19
GC69	755,9	755,5	-0,4	-0,05	755,5	-0,4	-0,05
GC18	756,8	755,5	-1,3	-0,17	755,5	-1,3	-0,17
GA19	751,5	751,6	0,1	0,01	751,6	0,1	0,01
GC56	751,8	751,7	-0,1	-0,01	751,7	-0,1	-0,01
GC80	758,3	758,2	-0,1	-0,02	758,2	-0,1	-0,02
GC74	745,7	745,9	0,2	0,03	745,9	0,2	0,03
GC99	752,1	752,3	0,2	0,03	752,3	0,2	0,03
GC47	752,6	752,2	-0,4	-0,05	752,2	-0,4	-0,05
GC42	751,4	750,9	-0,5	-0,07	750,9	-0,5	-0,07
GC75	751,0	751,6	0,6	0,08	751,6	0,6	0,08
GC107	754,2	754,5	0,3	0,04	754,5	0,3	0,04
GC64	752,6	752,7	0,1	0,01	752,7	0,1	0,01
GC01	752,3	752,0	-0,3	-0,05	752,0	-0,3	-0,05
GC58	756,8	756,6	-0,2	-0,03	756,6	-0,2	-0,03
GC87	767,3	767,7	0,4	0,05	767,7	0,4	0,05
GC62	761,4	761,2	-0,2	-0,03	761,2	-0,2	-0,03
GC101	738,4	738,5	0,1	0,01	738,5	0,1	0,01
GA08	751,8	752,1	0,3	0,04	752,1	0,3	0,04
GC63	754,3	754,3	0,0	0,00	754,3	0,0	0,00
GC91	738,8	739,1	0,3	0,04	739,1	0,3	0,04
GC29	768,0	768,3	0,3	0,04	768,3	0,3	0,04
GA14	754,2	754,1	-0,1	-0,02	754,1	-0,1	-0,02
GA16	752,4	752,2	-0,2	-0,03	752,2	-0,2	-0,03
GC106	753,3	753,1	-0,2	-0,03	753,1	-0,2	-0,03
GA22	753,3	753,5	0,2	0,03	753,5	0,2	0,03
GC17	754,5	754,3	-0,2	-0,02	754,3	-0,2	-0,02
GA18	764,1	764,0	-0,1	-0,01	764,0	-0,1	-0,01
GC84	759,0	759,0	0,0	0,01	759,0	0,0	0,01
GC90	753,0	753,4	0,4	0,05	753,4	0,4	0,05
GA02	752,7	752,6	-0,1	-0,02	752,6	-0,1	-0,02

Amostra	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	CONCLUSÃO		
					Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GC12	752,5	752,8	0,3	0,03	752,8	0,3	0,03
GC86	739,7	739,2	-0,5	-0,06	739,2	-0,5	-0,06
GC31	756,3	756,4	0,1	0,02	756,4	0,1	0,02
GC39	753,8	753,3	-0,5	-0,07	753,3	-0,5	-0,07
GC44	748,0	748,2	0,2	0,02	748,2	0,2	0,02
GC98	765,0	764,5	-0,5	-0,07	764,5	-0,5	-0,07
GC65	756,0	755,9	-0,1	-0,01	755,9	-0,1	-0,01
GC102	755,5	755,7	0,2	0,03	755,7	0,2	0,03
GC96	762,0	761,9	-0,1	-0,01	761,9	-0,1	-0,01
GC05	758,6	758,7	0,1	0,01	758,7	0,1	0,01
GC77	757,3	757,1	-0,2	-0,03	757,1	-0,2	-0,03
GC78	757,0	756,9	-0,1	-0,02	756,9	-0,1	-0,02
GA06	752,2	752,1	-0,1	-0,01	752,1	-0,1	-0,01
GC72	759,7	759,8	0,1	0,01	759,8	0,1	0,01
GC61	747,7	747,8	0,1	0,01	747,8	0,1	0,01
GC20	762,7	762,8	0,1	0,02	762,8	0,1	0,02
GC100	754,9	756,7	1,8	0,23	756,7	1,8	0,23
GC104	754,4	754,4	0,0	-0,01	754,4	0,0	-0,01
GC54	748,7	748,7	0,0	0,00	748,7	0,0	0,00
GC68	755,6	755,5	-0,1	-0,01	755,5	-0,1	-0,01
GC38	756,9	756,5	-0,4	-0,05	756,5	-0,4	-0,05
GC37	758,3	758,5	0,2	0,03	758,5	0,2	0,03
GC09	762,1	761,8	-0,3	-0,04	761,8	-0,3	-0,04
GC48	758,7	758,9	0,2	0,03	758,9	0,2	0,03
GA07	752,8	753,1	0,3	0,04	753,1	0,3	0,04
GC70	758,3	758,4	0,1	0,02	758,4	0,1	0,02
GC85	750,4	750,6	0,2	0,02	750,6	0,2	0,02
GC93	755,7	755,9	0,2	0,02	755,9	0,2	0,02
GA12	754,8	754,9	0,1	0,01	754,9	0,1	0,01
GC07	755,4	756,0	0,6	0,08	756,0	0,6	0,08
GA21	754,5	754,6	0,1	0,01	754,6	0,1	0,01
GC14	751,5	751,8	0,3	0,04	751,8	0,3	0,04
GC73	761,9	762,0	0,1	0,01	762,0	0,1	0,01
GC67	740,3	739,8	-0,5	-0,07	739,8	-0,5	-0,07
GA09	759,2	759,3	0,1	0,01	759,3	0,1	0,01
GA15	767,9	767,8	-0,1	-0,02	767,8	-0,1	-0,02
GC11	756,1	755,9	-0,2	-0,03	755,9	-0,2	-0,03
GA17	759,5	759,7	0,2	0,02	759,7	0,2	0,02
GC60	762,8	763,4	0,6	0,08	763,4	0,6	0,08
GC46	760,3	760,0	-0,3	-0,04	760,0	-0,3	-0,04
GC13	753,0	753,6	0,6	0,07	753,6	0,6	0,07
GC57	755,6	755,4	-0,2	-0,03	755,4	-0,2	-0,03
GC89	760,9	760,9	0,0	0,00	760,9	0,0	0,00
GC95	754,9	754,8	-0,1	-0,01	754,8	-0,1	-0,01
GC53	754,1	754,2	0,1	0,01	754,2	0,1	0,01
GC27	756,4	756,9	0,5	0,06	756,9	0,5	0,06
GC76	745,8	746,0	0,2	0,03	746,0	0,2	0,03
GC81	760,8	760,6	-0,2	-0,02	760,6	-0,2	-0,02

2 PRESSÃO DE VAPOR REID (kPa)

TABELA 2 – DESVIOS DE TREINAMENTO PLS E PCR

Amostra	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	CONTINUA
							Desvio relativo PCR (%)
GC25	54,1	54,2	0,1	0,2	52,7	-1,4	-2,5
GC59	35,7	35,7	0,0	0,0	35,4	-0,3	-0,8
GC34	52,7	53,2	0,5	0,9	54,3	1,6	3,1
GC26	54,3	55,1	0,8	1,4	54,6	0,3	0,5
GA13	45,0	46,0	1,0	2,1	47,5	2,5	5,5
GC28	51,2	51,0	-0,2	-0,3	49,9	-1,3	-2,5
GC16	53,8	54,2	0,4	0,7	53,3	-0,5	-0,9
GC10	51,5	51,8	0,3	0,6	50,2	-1,3	-2,5
GC35	52,4	53,0	0,6	1,1	54,7	2,3	4,4
GC79	48,0	51,1	3,1	6,5
GC69	50,5	50,6	0,1	0,1	50,6	0,1	0,2
GA19	53,4	53,2	-0,2	-0,3	53,7	0,3	0,6
GC56	53,5	53,6	0,1	0,1	53,6	0,1	0,2
GC80	49,9	50,2	0,3	0,6	52,0	2,1	4,2
GC74	31,1	30,9	-0,2	-0,5	29,7	-1,4	-4,6
GC99	31,4	31,5	0,1	0,3	31,7	0,3	1,0
GC47	51,6	52,2	0,6	1,1	52,4	0,8	1,6
GC42	38,6	39,4	0,8	2,1	42,7	4,1	10,5
GC75	32,9	32,7	-0,2	-0,5	31,7	-1,2	-3,6
GC107	58,8	58,3	-0,5	-0,9	59,6	0,8	1,3
GC64	56,5	56,2	-0,3	-0,5	55,1	-1,4	-2,5
GC58	51,7	51,8	0,1	0,3	52,6	0,9	1,8
GC87	18,4	18,3	-0,1	-0,3	19,2	0,8	4,4
GC62	47,6	47,7	0,1	0,1	49,1	1,5	3,3
GC101	38,1	37,4	-0,7	-1,8	37,7	-0,4	-1,0
GA08	53,9	54,2	0,3	0,6	52,6	-1,3	-2,5
GC63	53,6	53,8	0,2	0,3	54,0	0,4	0,8
GC91	42,5	42,1	-0,4	-0,9	40,3	-2,2	-5,2
GC29	50,5	50,0	-0,5	-1,0	48,9	-1,6	-3,3
GA14	51,8	52,4	0,6	1,1	53,0	1,2	2,4
GA16	52,5	52,3	-0,2	-0,3	51,0	-1,5	-2,8
GC106	58,0	57,6	-0,4	-0,7	58,4	0,4	0,7
GA22	52,8	52,7	-0,1	-0,3	52,8	0,0	-0,1
GA18	54,7	54,2	-0,5	-0,8	54,5	-0,2	-0,3
GC84	50,5	50,1	-0,4	-0,7	50,8	0,3	0,7
GC90	53,2	52,3	-0,9	-1,7	52,2	-1,0	-1,9
GC12	54,3	54,9	0,6	1,0	54,3	0,0	0,1
GC86	40,4	40,3	-0,1	-0,3	41,5	1,1	2,7
GC31	53,8	54,5	0,7	1,2	53,0	-0,8	-1,5
GC39	52,0	52,5	0,5	1,0	54,4	2,4	4,6
GC44	63,8	63,2	-0,6	-1,0	60,0	-3,8	-6,0
GC98	50,9	50,4	-0,5	-1,0	50,7	-0,2	-0,4
GC65	50,5	50,8	0,3	0,5	51,1	0,6	1,3
GC102	56,5	55,5	-1,0	-1,7	55,6	-0,9	-1,5
GC96	52,5	52,0	-0,5	-0,9	52,2	-0,3	-0,5
GC77	51,4	51,9	0,5	1,0	52,2	0,8	1,6

Amostra	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	CONCLUSÃO		
					Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GC78	50,8	50,8	0,0	0,0	51,6	0,8	1,6
GA06	52,7	53,0	0,3	0,5	52,5	-0,2	-0,4
GC72	35,2	35,1	-0,1	-0,4	34,9	-0,3	-0,9
GC61	39,2	39,2	0,0	-0,1	37,9	-1,3	-3,3
GC100	54,3	51,1	-3,2	-5,8	54,8	0,5	0,9
GC104	55,9	55,8	-0,1	-0,2	56,8	0,9	1,7
GC54	62,6	61,9	-0,7	-1,1	60,4	-2,2	-3,5
GC68	50,1	50,4	0,3	0,6	50,9	0,8	1,7
GC38	50,5	51,1	0,6	1,1	51,9	1,4	2,8
GC37	49,8	50,0	0,2	0,3	50,5	0,7	1,4
GC48	51,3	51,2	-0,1	-0,2	51,9	0,6	1,2
GA07	53,0	53,2	0,2	0,4	52,0	-1,0	-1,9
GC70	51,0	51,1	0,1	0,2	52,0	1,0	2,0
GC85	43,7	43,4	-0,3	-0,7	43,4	-0,3	-0,7
GC93	53,0	52,3	-0,7	-1,3	52,4	-0,6	-1,2
GA12	52,6	52,8	0,2	0,4	53,7	1,1	2,0
GA21	53,5	53,4	-0,1	-0,3	53,3	-0,2	-0,3
GC73	49,8	49,5	-0,3	-0,5	50,0	0,2	0,4
GC67	39,4	39,4	0,0	0,0	40,3	0,9	2,2
GA09	52,2	52,9	0,7	1,3	50,5	-1,7	-3,2
GA15	49,7	49,4	-0,3	-0,5	50,3	0,6	1,1
GC11	54,3	54,8	0,5	0,9	55,1	0,8	1,4
GC60	47,5	47,1	-0,4	-0,8	48,4	0,9	2,0
GC46	54,0	54,1	0,1	0,2	52,8	-1,2	-2,2
GC57	51,9	52,3	0,4	0,7	52,8	0,9	1,7
GC89	52,5	52,0	-0,5	-1,0	52,3	-0,2	-0,4
GC95	52,3	52,0	-0,3	-0,5	52,0	-0,3	-0,6
GC53	43,8	43,7	-0,1	-0,2	42,6	-1,2	-2,8
GC27	52,9	52,6	-0,3	-0,5	51,0	-1,9	-3,5
GC76	57,5	57,2	-0,3	-0,6	55,3	-2,2	-3,8
GC81	52,2	52,3	0,1	0,2	51,9	-0,3	-0,6

3 CURVA DE DESTILAÇÃO – T₁₀ (°C)

TABELA 3 – DESVIOS DE TREINAMENTO PLS E PCR

Amostra	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	Valor previsto PCR (%)	CONTINUA	
						Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GC25	54,0	54,3	0,3	0,5	54,3	0,3	0,6
GC59	63,0	62,6	-0,4	-0,6	62,5	-0,5	-0,7
GC34	54,8	55,0	0,2	0,3	54,2	-0,6	-1,1
GC26	54,3	53,8	-0,5	-1,0	54,1	-0,2	-0,4
GA13	58,3	58,2	-0,1	-0,1	57,5	-0,8	-1,3
GC28	55,7	55,5	-0,2	-0,3	56,0	0,3	0,6
GC16	55,6	55,6	0,0	0,1	55,3	-0,3	-0,6
GA01	55,7	56,2	0,5	0,9	55,8	0,1	0,2
GC10	54,6	55,1	0,5	0,9	55,3	0,7	1,3
GC35	54,6	54,5	-0,1	-0,1	53,8	-0,8	-1,5
GC03	56,3	56,0	-0,3	-0,6	55,7	-0,6	-1,1
GC79	57,7	55,6	-2,1	-3,6
GC69	55,3	55,1	-0,2	-0,4	55,4	0,1	0,1
GC18	56,8	56,1	-0,7	-1,3	55,7	-1,1	-2,0
GA19	54,2	54,2	0,0	-0,1	54,7	0,5	1,0
GC56	54,0	54,6	0,6	1,1	54,5	0,5	0,9
GC80	56,2	56,2	0,0	0,0	55,8	-0,4	-0,7
GC74	65,8	64,6	-1,2	-1,8	66,7	0,9	1,3
GC99	66,0	66,2	0,2	0,3	65,3	-0,7	-1,1
GC47	55,7	55,4	-0,3	-0,5	55,3	-0,4	-0,8
GC42	61,1	60,1	-1,0	-1,7	59,4	-1,7	-2,8
GC75	65,9	66,8	0,9	1,3	66,9	1,0	1,5
GC107	58,7	57,4	-1,3	-2,3	57,8	-0,9	-1,5
GC64	55,2	55,0	-0,2	-0,4	55,1	-0,1	-0,1
GC01	53,8	54,4	0,6	1,2	52,8	-1,0	-1,8
GC58	55,3	54,6	-0,7	-1,2	55,5	0,2	0,3
GC87	75,1	75,2	0,1	0,2	74,2	-0,9	-1,2
GC62	58,4	58,7	0,3	0,5	58,3	-0,1	-0,1
GC101	60,9	59,3	-1,6	-2,7	61,4	0,5	0,9
GA08	55,4	54,6	-0,8	-1,5	54,9	-0,5	-0,8
GC63	54,4	54,1	-0,3	-0,5	54,7	0,3	0,5
GC91	58,9	58,5	-0,4	-0,7	58,3	-0,6	-1,0
GC29	57,3	57,5	0,2	0,4	58,6	1,3	2,3
GA14	55,3	55,2	-0,1	-0,1	54,9	-0,4	-0,7
GA16	55,8	56,0	0,2	0,4	56,6	0,8	1,5
GC106	52,3	52,9	0,6	1,1	52,8	0,5	1,0
GA22	55,9	55,7	-0,2	-0,4	55,2	-0,7	-1,2
GC17	55,5	55,9	0,4	0,7	55,1	-0,4	-0,7
GA18	53,6	56,1	2,5	4,6	54,2	0,6	1,1
GC84	57,2	57,9	0,7	1,1	57,0	-0,2	-0,3
GC90	55,1	55,1	0,0	0,0	55,7	0,6	1,1
GA02	54,4	54,6	0,2	0,4	55,7	1,3	2,4

Amostra	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	CONCLUSÃO		
					Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GC12	53,8	53,9	0,1	0,1	53,7	-0,1	-0,2
GC86	59,5	59,5	0,0	0,0	58,6	-0,9	-1,5
GC31	53,6	52,7	-0,9	-1,6	53,6	0,0	0,0
GC39	53,2	53,6	0,4	0,8	52,8	-0,4	-0,8
GC44	51,2	51,5	0,3	0,6	52,4	1,2	2,3
GC98	56,5	56,6	0,1	0,1	56,5	0,0	-0,1
GC65	55,7	56,3	0,6	1,0	55,8	0,1	0,1
GC102	55,3	55,2	-0,1	-0,1	55,8	0,5	0,9
GC96	56,0	56,0	0,0	0,1	55,8	-0,2	-0,3
GC05	65,1	64,6	-0,5	-0,8	65,8	0,7	1,0
GC77	56,0	54,7	-1,3	-2,4	55,7	-0,3	-0,5
GC78	55,9	55,6	-0,3	-0,6	55,5	-0,4	-0,7
GA06	54,2	53,9	-0,3	-0,5	54,2	0,0	-0,1
GC72	65,2	65,5	0,3	0,4	65,6	0,4	0,6
GC61	62,9	62,7	-0,2	-0,3	62,2	-0,7	-1,0
GC20	56,8	56,6	-0,2	-0,3	56,8	0,0	0,1
GC100	53,5	55,6	2,1	3,9
GC104	52,8	52,8	0,0	-0,1	53,0	0,2	0,4
GC54	50,4	50,7	0,3	0,6	50,9	0,5	1,1
GC68	54,7	54,8	0,1	0,3	54,6	-0,1	-0,1
GC38	56,6	56,7	0,1	0,2	55,9	-0,7	-1,3
GC37	55,8	56,0	0,2	0,3	55,5	-0,3	-0,5
GC09	56,2	56,3	0,1	0,3	56,4	0,2	0,3
GC48	56,7	57,4	0,7	1,3	56,7	0,0	0,0
GA07	54,6	54,7	0,1	0,3	54,8	0,2	0,5
GC70	55,6	54,6	-1,0	-1,7	55,3	-0,3	-0,5
GC85	58,8	59,5	0,7	1,2	59,3	0,5	0,9
GC93	55,1	55,5	0,4	0,7	54,9	-0,2	-0,4
GA12	54,9	55,0	0,1	0,2	54,6	-0,3	-0,5
GC07	56,6	56,9	0,3	0,5	56,9	0,3	0,5
GA21	53,9	54,3	0,4	0,7	53,8	-0,1	-0,1
GC14	53,7	54,1	0,4	0,7	53,3	-0,4	-0,7
GC73	56,8	56,4	-0,4	-0,6	56,8	0,0	0,0
GC67	56,1	56,9	0,8	1,5	56,2	0,1	0,2
GA09	55,4	54,5	-0,9	-1,7	55,3	-0,1	-0,2
GA15	58,4	58,8	0,4	0,8	58,8	0,4	0,7
GC11	54,4	54,1	-0,3	-0,6	53,9	-0,5	-0,9
GA17	56,1	56,0	-0,1	-0,1	56,8	0,7	1,2
GC60	58,4	58,7	0,3	0,5	59,2	0,8	1,4
GC46	54,6	54,1	-0,5	-1,0	54,7	0,1	0,3
GC13	54,8	55,2	0,4	0,7	55,0	0,2	0,4
GC57	54,9	55,4	0,5	0,9	55,2	0,3	0,5
GC89	55,4	55,4	0,0	0,0	55,1	-0,3	-0,6
GC95	54,0	54,6	0,6	1,2	54,4	0,4	0,7
GC53	54,8	55,2	0,4	0,7	56,3	1,5	2,7
GC27	55,1	55,2	0,1	0,1	55,4	0,3	0,5
GC76	53,3	52,5	-0,8	-1,5	53,5	0,2	0,4
GC81	55,0	55,1	0,1	0,2	54,7	-0,3	-0,5

4 CURVA DE DESTILAÇÃO – T₅₀ (°C)

TABELA 4 – DESVIOS DE TREINAMENTO PLS E PCR

Amostra	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	CONTINUA
							Desvio relativo PCR (%)
GC25	72,0	72,1	0,1	0,1	72,0	0,0	0,1
GC59	68,6	68,7	0,1	0,2	68,8	0,2	0,2
GC34	72,2	72,2	0,0	0,0	72,2	0,0	0,0
GC26	72,1	72,2	0,1	0,1	72,2	0,1	0,1
GA13	72,9	72,9	0,0	0,0	72,9	0,0	0,0
GC28	73,2	73,2	0,0	0,0	73,2	0,0	0,0
GC16	72,5	72,5	0,0	0,0	72,5	0,0	0,0
GA01	72,7	72,8	0,1	0,1	72,7	0,0	0,1
GC10	72,3	72,4	0,1	0,1	72,3	0,0	0,0
GC35	72,3	72,2	-0,1	-0,1	72,2	-0,1	-0,1
GC03	72,5	72,4	-0,1	-0,1	72,4	-0,1	-0,1
GC79	72,8	72,3	-0,5	-0,7	72,4	-0,4	-0,6
GC69	72,5	72,5	0,0	0,0	72,5	0,0	0,0
GC18	72,6	72,4	-0,2	-0,2	72,4	-0,2	-0,3
GA19	72,2	72,2	0,0	0,0	72,3	0,1	0,1
GC56	71,8	71,9	0,1	0,2	71,9	0,1	0,2
GC80	72,0	71,9	-0,1	-0,1	71,9	-0,1	-0,1
GC74	69,8	70,0	0,2	0,3	69,9	0,1	0,1
GC99	72,0	72,1	0,1	0,1	72,3	0,3	0,4
GC47	71,9	71,9	0,0	0,0	71,9	0,0	0,0
GC42	69,3	69,3	0,0	0,0	69,2	-0,1	-0,1
GC75	71,5	71,7	0,2	0,3	71,7	0,2	0,2
GC107	71,9	71,8	-0,1	-0,2	71,9	0,0	-0,1
GC64	72,6	72,7	0,1	0,1	72,6	0,0	0,0
GC01	72,0	72,0	0,0	0,0	71,9	-0,1	-0,2
GC58	73,1	73,1	0,0	0,1	73,1	0,0	-0,1
GC87	76,0	76,2	0,2	0,3	76,3	0,3	0,4
GC62	73,8	73,9	0,1	0,1	73,8	0,0	0,0
GC101	64,7	64,7	0,0	0,0	64,7	0,0	-0,1
GA08	72,3	72,3	0,0	0,0	72,3	0,0	0,0
GC63	72,4	72,5	0,1	0,1	72,4	0,0	0,0
GC91	67,1	67,0	-0,1	-0,1	67,1	0,0	0,0
GC29	74,6	74,7	0,1	0,1	74,7	0,1	0,1
GA14	72,2	72,1	-0,1	-0,1	72,1	-0,1	-0,1
GA16	72,3	72,2	-0,1	-0,1	72,3	0,0	0,0
GC106	71,6	71,5	-0,1	-0,2	71,6	0,0	0,0
GA22	73,1	73,1	0,0	0,0	73,1	0,0	0,0
GC17	72,3	72,3	0,0	0,0	72,3	0,0	0,0
GA18	73,5	73,4	-0,1	-0,1	73,3	-0,2	-0,2
GC84	73,5	73,4	-0,1	-0,1	73,5	0,0	0,0
GC90	72,0	71,9	-0,1	-0,2	72,0	0,0	0,0
GA02	71,2	71,1	-0,1	-0,1	71,3	0,1	0,1
GC12	72,0	72,1	0,1	0,1	72,1	0,1	0,1
GC86	65,0	65,1	0,1	0,1	65,0	0,0	0,0
GC31	72,4	72,2	-0,2	-0,2	72,2	-0,2	-0,3
GC39	72,4	72,3	-0,1	-0,2	72,3	-0,1	-0,2

Amostra	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	CONCLUSÃO		
					Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GC44	72,3	72,4	0,1	0,1	72,4	0,1	0,1
GC98	74,5	74,4	-0,1	-0,1	74,4	-0,1	-0,1
GC65	72,7	72,8	0,1	0,2	72,7	0,0	0,1
GC102	72,8	72,7	-0,1	-0,1	72,8	0,0	0,0
GC96	73,8	73,7	-0,1	-0,2	73,7	-0,1	-0,1
GC05	73,1	73,1	0,0	0,0	73,1	0,0	0,0
GC77	72,8	72,8	0,0	0,0	72,8	0,0	0,0
GC78	73,0	73,0	0,0	0,0	73,0	0,0	0,0
GA06	72,1	72,1	0,0	0,0	72,1	0,0	0,0
GC72	71,4	71,6	0,2	0,3	71,5	0,1	0,2
GC61	73,0	73,1	0,1	0,1	73,1	0,1	0,1
GC20	73,9	73,9	0,0	0,0	73,9	0,0	0,0
GC100	72,1	72,3	0,2	0,3	72,4	0,3	0,4
GC104	72,2	72,1	-0,1	-0,2	72,2	0,0	0,0
GC54	72,3	72,3	0,0	0,0	72,4	0,1	0,1
GC68	73,0	73,0	0,0	-0,1	72,9	-0,1	-0,1
GC38	72,6	72,5	-0,1	-0,2	72,5	-0,1	-0,2
GC37	72,8	72,8	0,0	0,0	72,8	0,0	0,0
GC09	73,7	73,7	0,0	0,0	73,7	0,0	0,0
GC48	73,2	73,1	-0,1	-0,1	73,1	-0,1	-0,1
GA07	72,8	72,8	0,0	0,0	72,7	-0,1	-0,1
GC70	73,3	73,4	0,1	0,1	73,3	0,0	0,1
GC85	71,0	71,1	0,1	0,1	71,1	0,1	0,1
GC93	72,8	72,6	-0,2	-0,3	72,6	-0,2	-0,2
GA12	72,7	72,7	0,0	0,1	72,8	0,1	0,1
GC07	72,4	72,5	0,1	0,1	72,4	0,0	0,0
GA21	72,4	72,4	0,0	0,0	72,4	0,0	0,1
GC14	72,8	72,8	0,0	0,0	72,8	0,0	0,0
GC73	73,6	73,6	0,0	0,0	73,5	-0,1	-0,1
GC67	73,0	72,8	-0,2	-0,3	72,5	-0,5	-0,7
GA09	73,0	73,1	0,1	0,1	73,0	0,0	0,1
GA15	74,9	74,9	0,0	-0,1	74,9	0,0	0,0
GC11	72,4	72,4	0,0	0,0	72,4	0,0	0,0
GA17	73,0	73,2	0,2	0,2	73,1	0,1	0,1
GC60	74,2	74,3	0,1	0,2	74,3	0,1	0,1
GC46	73,4	73,4	0,0	0,0	73,4	0,0	0,0
GC13	72,0	72,3	0,3	0,4	72,2	0,2	0,3
GC57	72,5	72,4	-0,1	-0,1	72,5	0,0	-0,1
GC89	73,7	73,6	-0,1	-0,1	73,7	0,0	0,0
GC95	72,0	72,0	0,0	0,1	72,1	0,1	0,2
GC53	72,5	72,5	0,0	0,0	72,5	0,0	0,1
GC27	72,6	72,7	0,1	0,1	72,7	0,1	0,1
GC76	72,0	72,1	0,1	0,1	72,1	0,1	0,2
GC81	72,5	72,5	0,0	0,0	72,6	0,1	0,1

5 CURVA DE DESTILAÇÃO – T₉₀ (°C)

TABELA 5 – DESVIOS DE TREINAMENTO PLS E PCR

Amostra	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	CONTINUA
							Desvio relativo PCR (%)
GC25	165,0	166,6	1,6	1,0	166,9	1,9	1,2
GC59	105,8	110,4	4,6	4,4	115,6	9,8	9,3
GC34	166,0	167,4	1,4	0,9	170,0	4,0	2,4
GC26	167,7	167,8	0,1	0,1	169,6	1,9	1,1
GA13	168,9	170,1	1,2	0,7	169,7	0,8	0,4
GC28	166,0	164,4	-1,6	-1,0	162,2	-3,8	-2,3
GC16	160,4	162,1	1,7	1,1	162,7	2,3	1,4
GA01	166,7	166,2	-0,5	-0,3	164,8	-1,9	-1,2
GC10	165,0	167,0	2,0	1,2	165,7	0,7	0,4
GC35	166,4	168,9	2,5	1,5	170,5	4,1	2,5
GC03	166,4	167,7	1,3	0,8	166,6	0,2	0,1
GC79	169,1	168,3	-0,8	-0,4	170,2	1,1	0,6
GC69	166,5	164,1	-2,4	-1,5	161,8	-4,7	-2,8
GC18	168,8	169,0	0,2	0,1	168,6	-0,2	-0,1
GA19	163,2	163,0	-0,2	-0,1	160,2	-3,0	-1,8
GC56	159,7	162,4	2,7	1,7	158,4	-1,3	-0,8
GC80	164,7	167,0	2,3	1,4	169,7	5,0	3,0
GC74	105,3	101,9	-3,4	-3,2	104,3	-1,0	-1,0
GC99	176,9	174,4	-2,5	-1,4	171,4	-5,5	-3,1
GC47	164,6	166,1	1,5	0,9	163,4	-1,2	-0,7
GC42	136,9	130,4	-6,5	-4,8	121,8	-15,1	-11,0
GC75	107,7	110,8	3,1	2,9	115,8	8,1	7,5
GC107	171,5	172,3	0,8	0,5	176,0	4,5	2,6
GC64	160,4	159,8	-0,6	-0,4	161,7	1,3	0,8
GC01	162,7	162,6	-0,1	0,0	162,9	0,2	0,1
GC58	166,6	164,8	-1,8	-1,1	167,1	0,5	0,3
GC87	131,1	130,0	-1,1	-0,9	124,3	-6,8	-5,2
GC62	163,9	162,7	-1,2	-0,7	161,0	-2,9	-1,8
GC101	103,0	99,2	-3,8	-3,7	99,8	-3,2	-3,1
GA08	165,0	164,6	-0,4	-0,2	166,8	1,8	1,1
GC63	165,4	164,3	-1,1	-0,7	167,6	2,2	1,3
GC91	138,5	136,0	-2,5	-1,8
GC29	149,9	148,3	-1,6	-1,1	148,5	-1,4	-0,9
GA14	166,1	166,7	0,6	0,3	167,3	1,2	0,7
GA16	159,9	160,9	1,0	0,6	155,7	-4,2	-2,6
GC106	168,6	167,8	-0,8	-0,5	170,8	2,2	1,3
GA22	167,8	168,6	0,8	0,5	165,0	-2,8	-1,7
GC17	163,4	165,7	2,3	1,4	164,2	0,8	0,5
GA18	173,1	174,2	1,1	0,7	169,6	-3,5	-2,0
GC84	157,4	160,9	3,5	2,2	161,0	3,6	2,3
GC90	167,1	165,0	-2,1	-1,2	164,9	-2,2	-1,3
GA02	163,1	160,7	-2,4	-1,5	165,4	2,3	1,4
GC12	164,1	165,8	1,7	1,0	167,3	3,2	1,9
GC86	107,6	107,4	-0,2	-0,1	104,3	-3,3	-3,1
GC31	167,6	165,5	-2,1	-1,2	167,6	0,0	0,0
GC39	159,7	161,9	2,2	1,4	164,4	4,7	2,9

Amostra	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	CONCLUSÃO		
					Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GC44	160,0	160,2	0,2	0,1	156,7	-3,3	-2,1
GC98	150,6	151,0	0,4	0,3	152,5	1,9	1,3
GC65	167,4	168,3	0,9	0,6	168,5	1,1	0,6
GC102	168,1	165,4	-2,7	-1,6	166,0	-2,1	-1,2
GC96	160,0	159,2	-0,8	-0,5	160,2	0,2	0,1
GC05	155,2	147,1	-8,1	-5,2	147,6	-7,6	-4,9
GC77	169,9	166,9	-3,0	-1,7	168,4	-1,5	-0,9
GC78	159,0	159,3	0,3	0,2	157,7	-1,3	-0,8
GA06	159,1	157,6	-1,5	-1,0	160,1	1,0	0,6
GC72	98,1	103,3	5,2	5,3	110,4	12,3	12,5
GC61	138,1	139,6	1,5	1,1	141,4	3,3	2,4
GC20	155,4	159,3	3,9	2,5	159,9	4,5	2,9
GC100	169,9	168,3	-1,6	-0,9	170,2	0,3	0,2
GC104	171,1	169,3	-1,8	-1,0	174,3	3,2	1,9
GC54	160,8	161,5	0,7	0,5	160,2	-0,6	-0,4
GC68	157,9	159,1	1,2	0,8	157,5	-0,4	-0,3
GC38	165,5	166,6	1,1	0,7	167,6	2,1	1,3
GC37	162,8	164,8	2,0	1,2	164,6	1,8	1,1
GC09	155,5	157,2	1,7	1,1	157,9	2,4	1,5
GC48	150,9	153,1	2,2	1,4	150,2	-0,7	-0,4
GA07	160,2	160,6	0,4	0,3	161,2	1,0	0,6
GC70	161,4	160,9	-0,5	-0,3	161,2	-0,2	-0,1
GC85	140,6	142,4	1,8	1,3	143,3	2,7	2,0
GC93	163,1	163,3	0,2	0,1	162,2	-0,9	-0,6
GA12	165,4	165,2	-0,2	-0,1	166,8	1,4	0,8
GC07	170,8	171,3	0,5	0,3	168,9	-1,9	-1,1
GA21	163,3	164,1	0,8	0,5	161,6	-1,7	-1,0
GC14	158,1	162,1	4,0	2,6	164,1	6,0	3,8
GC73	153,5	152,3	-1,2	-0,8	152,9	-0,6	-0,4
GC67
GA09	168,1	163,2	-4,9	-2,9	162,0	-6,1	-3,6
GA15	144,3	147,0	2,7	1,9	148,5	4,2	2,9
GC11	166,1	168,2	2,1	1,3	169,1	3,0	1,8
GA17	174,8	172,0	-2,8	-1,6	170,1	-4,7	-2,7
GC60	161,1	159,2	-1,9	-1,2	158,3	-2,8	-1,7
GC46	190,6	185,9	-4,7	-2,5	179,5	-11,1	-5,8
GC13	161,6	163,6	2,0	1,2	162,4	0,8	0,5
GC57	164,6	165,1	0,5	0,3	160,6	-4,0	-2,4
GC89	160,0	160,1	0,1	0,0	159,7	-0,3	-0,2
GC95	166,0	165,7	-0,3	-0,2	164,6	-1,4	-0,9
GC53	159,2	157,6	-1,6	-1,0	152,5	-6,7	-4,2
GC27	163,2	160,2	-3,0	-1,8	159,6	-3,6	-2,2
GC76	156,8	156,6	-0,2	-0,1	161,8	5,0	3,2
GC81	164,7	168,2	3,5	2,1	169,8	5,1	3,1

6 CURVA DE DESTILAÇÃO – T_{PFE} (°C)

TABELA 6 – DESVIOS DE TREINAMENTO PLS E PCR

Amostra	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	CONTINUA
							Desvio relativo PCR (%)
GC25	220,5	220,2	-0,3	-0,1	219,0	-1,5	-0,7
GC59	173,9	172,0	-1,9	-1,1	176,7	2,8	1,6
GC34	209,7	208,1	-1,6	-0,7	207,2	-2,5	-1,2
GC26	211,8	214,0	2,2	1,0	214,3	2,5	1,2
GA13	209,8	211,6	1,8	0,8	209,7	-0,1	0,0
GC28	213,9	215,3	1,4	0,7	214,4	0,5	0,2
GC16	210,1	211,3	1,2	0,6	210,4	0,3	0,2
GA01	214,3	216,4	2,1	1,0	216,2	1,9	0,9
GC10	233,2	231,2	-2,0	-0,9	230,1	-3,1	-1,3
GC35	209,2	208,1	-1,1	-0,5	207,4	-1,8	-0,8
GC03	221,4	221,4	0,0	0,0	220,0	-1,4	-0,6
GC79	232,3	222,2	-10,1	-4,4	222,2	-10,1	-4,4
GC69	232,3	232,1	-0,2	-0,1	231,3	-1,0	-0,4
GC18	230,8	229,8	-1,0	-0,4	228,9	-1,9	-0,8
GA19	208,7	206,2	-2,5	-1,2	208,4	-0,3	-0,1
GC56	207,4	210,5	3,1	1,5	208,4	1,0	0,5
GC80	216,7	214,5	-2,2	-1,0	212,5	-4,2	-1,9
GC74	158,1	158,0	-0,1	-0,1	157,8	-0,3	-0,2
GC99	211,9	210,9	-1,0	-0,5	217,7	5,8	2,7
GC47	224,3	227,9	3,6	1,6	226,5	2,2	1,0
GC42	179,3	176,9	-2,4	-1,4	176,2	-3,1	-1,7
GC75	167,6	164,3	-3,3	-2,0	163,3	-4,3	-2,6
GC107	211,3	215,6	4,3	2,0	214,4	3,1	1,5
GC64	210,9	213,7	2,8	1,3	216,2	5,3	2,5
GC01	206,4	207,1	0,7	0,3	211,3	4,9	2,4
GC58	211,0	211,2	0,2	0,1	210,7	-0,3	-0,1
GC87	195,3	194,9	-0,4	-0,2	193,0	-2,3	-1,2
GC62	211,8	211,2	-0,6	-0,3	211,5	-0,3	-0,1
GC101	169,2	171,3	2,1	1,2	168,2	-1,0	-0,6
GA08	210,0	211,0	1,0	0,5	212,1	2,1	1,0
GC63	208,7	209,3	0,6	0,3	209,8	1,1	0,5
GC91	190,0	191,3	1,3	0,7	183,4	-6,6	-3,5
GC29	206,2	209,5	3,3	1,6	212,8	6,6	3,2
GA14	212,4	210,2	-2,2	-1,0	209,3	-3,1	-1,5
GA16	208,7	207,9	-0,8	-0,4	204,6	-4,1	-2,0
GC106	209,6	210,7	1,1	0,5	211,5	1,9	0,9
GA22	220,5	222,0	1,5	0,7	221,2	0,7	0,3
GC17	209,1	210,3	1,2	0,6	208,7	-0,4	-0,2
GA18	205,2	205,6	0,4	0,2	202,2	-3,0	-1,5
GC84	208,3	207,2	-1,1	-0,5	208,1	-0,2	-0,1
GC90	210,6	211,9	1,3	0,6	214,5	3,9	1,8
GA02	207,6	197,1	-10,5	-5,1	205,9	-1,7	-0,8
GC12	210,2	212,8	2,6	1,2	212,2	2,0	1,0
GC86	182,3	186,2	3,9	2,1	189,2	6,9	3,8
GC31	209,5	212,5	3,0	1,4	214,5	5,0	2,4
GC39	206,7	205,0	-1,7	-0,8	205,1	-1,6	-0,8

Amostra	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	CONCLUSÃO		
					Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GC44	230,6	232,5	1,9	0,8	232,6	2,0	0,9
GC98	204,4	204,7	0,3	0,2	205,4	1,0	0,5
GC65	233,4	232,0	-1,4	-0,6	233,7	0,3	0,1
GC102	223,2	219,9	-3,3	-1,5	221,8	-1,4	-0,6
GC96	205,9	204,9	-1,0	-0,5	203,8	-2,1	-1,0
GC05	198,1	196,3	-1,8	-0,9	196,8	-1,3	-0,7
GC77	229,1	228,5	-0,6	-0,2	226,7	-2,4	-1,0
GC78	207,6	207,2	-0,4	-0,2	207,1	-0,5	-0,2
GA06	207,9	206,0	-1,9	-0,9	206,8	-1,1	-0,5
GC72	179,2	176,1	-3,1	-1,7	176,0	-3,2	-1,8
GC61	201,2	203,3	2,1	1,1	207,8	6,6	3,3
GC20	206,4	204,8	-1,6	-0,8	205,1	-1,3	-0,6
GC100	210,5	222,2	11,7	5,6	222,2	11,7	5,5
GC104	211,8	215,3	3,5	1,6	215,4	3,6	1,7
GC54	252,8	250,8	-2,0	-0,8	250,8	-2,0	-0,8
GC68	209,3	210,0	0,7	0,4	208,5	-0,8	-0,4
GC38	233,7	232,1	-1,6	-0,7	231,8	-1,9	-0,8
GC37	235,6	232,7	-2,9	-1,2	232,3	-3,3	-1,4
GC09	204,6	204,2	-0,4	-0,2	205,6	1,0	0,5
GC48	209,2	210,2	1,0	0,5	209,0	-0,2	-0,1
GA07	203,1	204,0	0,9	0,4	204,9	1,8	0,9
GC70	209,8	209,4	-0,4	-0,2	208,1	-1,7	-0,8
GC85	201,7	201,2	-0,5	-0,3	201,2	-0,5	-0,3
GC93	209,7	207,8	-1,9	-0,9	206,9	-2,8	-1,3
GA12	210,5	208,0	-2,5	-1,2	207,3	-3,2	-1,5
GC07	248,3	249,4	1,1	0,5	247,7	-0,6	-0,2
GA21	208,9	209,2	0,3	0,1	208,0	-0,9	-0,4
GC14	198,2	200,4	2,2	1,1	198,9	0,7	0,4
GC73	207,0	202,8	-4,2	-2,0	202,1	-4,9	-2,4
GC67	271,8	271,5	-0,3	-0,1	274,6	2,8	1,0
GA09	217,0	221,8	4,8	2,2	223,4	6,4	2,9
GA15	203,1	202,4	-0,7	-0,3	205,7	2,6	1,3
GC11	211,0	207,9	-3,1	-1,5	205,7	-5,3	-2,5
GA17	271,8	271,5	-0,3	-0,1	268,3	-3,5	-1,3
GC60	209,3	209,4	0,1	0,0	210,0	0,7	0,3
GC46	323,2	318,8	-4,4	-1,4	317,8	-5,4	-1,7
GC13	206,6	210,6	4,0	1,9	209,0	2,4	1,2
GC57	235,2	235,0	-0,2	-0,1	233,5	-1,7	-0,7
GC89	207,3	207,5	0,2	0,1	206,3	-1,0	-0,5
GC95	224,5	226,5	2,0	0,9	225,8	1,3	0,6
GC53	207,7	212,6	4,9	2,4	213,8	6,1	3,0
GC27	208,4	210,6	2,2	1,1	211,3	2,9	1,4
GC76	210,8	210,6	-0,2	-0,1	213,0	2,2	1,1
GC81	210,4	207,4	-3,0	-1,4	206,8	-3,6	-1,7

7 TEOR DE AROMÁTICOS (% v/v)

TABELA 7 – DESVIOS DE TREINAMENTO PLS E PCR

Amostra	CONTINUA						
	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GC25	15,6	15,6	0,0	-0,1	16,0	0,4	2,4
GC59	4,0	4,3	0,2	5,7	4,7	0,7	17,1
GC34	16,5	16,4	-0,1	-0,6	16,4	-0,1	-0,5
GC26	17,3	17,3	0,0	0,0	17,4	0,1	0,8
GA13	17,0	16,6	-0,4	-2,4	15,8	-1,2	-7,1
GC28	16,7	16,7	0,0	0,2	15,7	-0,9	-5,6
GC16	14,6	14,7	0,1	0,4	14,3	-0,3	-2,2
GA01	15,7	15,7	-0,1	-0,4	16,3	0,5	3,3
GC10	15,2	15,2	0,0	-0,3	15,4	0,2	1,0
GC35	17,2	16,9	-0,3	-1,6	16,7	-0,5	-2,9
GC03	16,3	16,3	0,0	-0,2	16,4	0,1	0,7
GC79	16,4	17,5	1,1	7,0	18,3	1,9	11,6
GC69	15,0	15,1	0,0	0,2	15,3	0,2	1,4
GC18	16,4	16,0	-0,4	-2,3	16,1	-0,3	-1,6
GA19	13,2	13,5	0,3	1,9	14,6	1,4	10,5
GC56	15,5	15,4	-0,1	-0,6	15,1	-0,4	-2,4
GC80	15,5	15,5	0,1	0,5	15,6	0,1	0,8
GC74	4,3	4,3	0,0	0,1	4,2	0,0	-0,2
GC99	15,1	15,2	0,1	0,4
GC47	15,5	15,2	-0,3	-1,7	15,3	-0,1	-0,8
GC42	10,5	10,3	-0,1	-1,2	10,7	0,2	2,0
GC75	10,4	11,0	0,6	5,8
GC107	18,7	19,0	0,3	1,7	19,4	0,7	3,7
GC64	14,6	14,5	-0,1	-0,7	14,7	0,0	0,2
GC01	15,8	15,5	-0,2	-1,5	16,8	1,0	6,6
GC58	17,1	17,1	0,0	-0,2	17,2	0,1	0,7
GC87	9,4	9,7	0,3	3,3	9,5	0,0	0,5
GC62	15,8	15,6	-0,2	-1,3	14,8	-1,0	-6,6
GC101	1,3	1,4	0,1	9,6	2,2	0,9	70,2
GA08	15,3	15,6	0,3	2,2	16,5	1,3	8,2
GC63	16,4	16,4	0,0	-0,2	16,8	0,4	2,6
GC91	4,6	4,2	-0,4	-8,3	5,1	0,5	10,6
GC29	12,0	12,1	0,1	0,9	11,5	-0,5	-4,1
GA14	16,9	16,8	-0,2	-1,0	16,7	-0,2	-1,3
GA16	15,1	15,2	0,0	0,1	14,9	-0,3	-1,7
GC106	18,2	18,3	0,1	0,6	18,4	0,3	1,5
GA22	15,3	15,4	0,1	0,8	15,5	0,3	1,8
GC17	16,1	16,1	0,0	0,0	16,0	-0,1	-0,5
GA18	18,5	18,6	0,1	0,4
GC84	14,3	14,3	0,0	-0,1	13,6	-0,7	-4,7
GC90	17,2	17,0	-0,1	-0,8	17,3	0,1	0,6
GA02	16,7	16,4	-0,3	-1,8	17,6	0,9	5,3
GC12	16,1	16,1	0,1	0,4	16,3	0,2	1,5
GC86	2,2	2,2	0,1	3,2	3,6	1,4	66,0
GC31	17,8	18,1	0,3	1,6	18,9	1,0	5,8
GC39	16,0	15,7	-0,2	-1,3	15,9	-0,1	-0,4

Amostra	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	CONCLUSÃO		
					Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GC44	15,5	15,6	0,1	0,6	15,3	-0,2	-1,5
GC98	12,1	12,4	0,3	2,3	11,8	-0,4	-3,1
GC65	15,7	15,5	-0,3	-1,6	16,1	0,4	2,4
GC102	16,6	16,6	-0,1	-0,3	16,5	-0,1	-0,6
GC96	15,5	15,6	0,2	1,2	14,4	-1,1	-7,1
GC05	14,1	14,2	0,1	0,8	14,6	0,6	4,1
GC77	15,8	15,8	0,0	0,0	16,0	0,2	1,3
GC78	14,9	14,7	-0,1	-1,0	14,5	-0,4	-2,7
GA06	14,8	14,6	-0,2	-1,4	14,8	0,0	-0,1
GC72	9,6	10,2	0,6	5,8	8,2	-1,4	-14,7
GC61	9,9	9,9	0,0	-0,4	11,0	1,0	10,5
GC20	13,0	12,9	-0,1	-0,9	12,2	-0,8	-6,3
GC100	18,2	17,5	-0,7	-3,7	18,3	0,1	0,4
GC104	18,9	19,0	0,0	0,1	19,2	0,3	1,5
GC54	15,9	16,0	0,0	0,1	15,7	-0,2	-1,4
GC68	15,2	15,3	0,0	0,3	15,3	0,1	0,7
GC38	14,4	14,2	-0,3	-1,9	14,1	-0,4	-2,4
GC37	14,4	14,1	-0,3	-2,2	13,6	-0,8	-5,6
GC09	13,2	13,1	-0,1	-0,4	12,5	-0,7	-5,4
GC48	13,3	13,2	-0,1	-0,5	12,5	-0,7	-5,5
GA07	14,3	14,5	0,2	1,7	15,0	0,7	5,2
GC70	14,4	14,6	0,2	1,6	14,5	0,1	0,9
GC85	11,4	11,6	0,2	1,6	12,1	0,7	6,0
GC93	16,2	16,2	-0,1	-0,4	15,7	-0,5	-3,1
GA12	17,1	17,0	-0,1	-0,6	16,7	-0,4	-2,5
GC07	14,5	14,6	0,1	1,0	15,1	0,6	4,2
GA21	14,9	15,1	0,2	1,2	15,4	0,4	2,9
GC14	15,1	15,4	0,3	2,0	15,6	0,5	3,4
GC73	13,4	13,5	0,1	0,7	12,6	-0,8	-5,7
GC67	1,9	1,3	-0,5	-29,7	1,9	0,1	3,7
GA09	16,8	17,1	0,3	1,5	17,1	0,3	1,9
GA15	11,0	11,0	0,1	0,7	10,6	-0,3	-3,0
GC11	16,8	16,8	0,0	-0,1	16,4	-0,4	-2,5
GA17	17,0	16,9	0,0	-0,1	16,4	-0,6	-3,4
GC60	15,1	14,9	-0,2	-1,1	13,7	-1,4	-9,0
GC46	15,8	15,4	-0,4	-2,2	15,0	-0,8	-5,2
GC13	15,6	15,6	-0,1	-0,4	15,6	0,0	-0,1
GC57	15,1	15,1	0,0	-0,2	14,7	-0,4	-2,6
GC89	14,8	14,9	0,1	0,8	14,1	-0,7	-4,9
GC95	15,8	15,8	0,1	0,4	15,8	0,0	0,0
GC53	10,3	10,2	-0,1	-1,3	9,9	-0,4	-4,1
GC27	15,6	15,5	-0,1	-0,4	15,1	-0,5	-3,1
GC76	11,9	12,1	0,2	1,3	13,0	1,1	9,1
GC81	16,2	15,9	-0,3	-2,0	15,0	-1,2	-7,4

38 TEOR DE PARAFÍNICOS(% v/v)

TABELA 11 – DESVIOS DE TREINAMENTO PLS E PCR

CONTINUA

Amostra	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GC25	12,1	11,9	-0,2	-1,4	11,9	-0,1	-1,1
GC59	17,9	18,1	0,2	1,1	18,2	0,3	1,4
GC34	10,8	10,8	0,0	-0,1	10,8	0,0	0,3
GC26	10,1	10,0	-0,1	-0,7	10,0	0,0	-0,4
GA13	9,8	9,9	0,1	0,7	9,9	0,1	1,1
GC28	9,1	9,2	0,2	1,7	9,2	0,1	1,2
GC16	11,4	11,0	-0,3	-2,7	11,1	-0,3	-2,3
GA01	11,5	11,4	-0,1	-1,2	11,4	-0,1	-1,0
GC10	11,8	11,9	0,1	0,7	12,0	0,1	1,1
GC35	10,6	10,7	0,1	0,7	10,7	0,1	1,2
GC03	10,7	10,8	0,1	0,9	10,9	0,2	1,4
GC79	12,5	11,4	-1,1	-9,2	11,3	-1,2	-9,8
GC69	10,8	10,9	0,1	0,5	10,8	0,0	0,1
GC18	10,9	11,1	0,2	1,6	11,2	0,2	2,1
GA19	12,3	12,2	0,0	-0,2	12,2	0,0	-0,3
GC56	12,1	12,1	0,0	0,0	12,2	0,0	0,3
GC80	10,3	10,2	-0,1	-1,2	10,2	-0,1	-1,1
GC74	14,0	13,9	-0,1	-0,5	13,9	0,0	-0,1
GC99	16,2	16,5	0,4	2,2	16,4	0,3	1,6
GC47	12,8	12,8	0,0	-0,2	12,8	0,0	0,0
GC42	14,1	13,9	-0,1	-0,9	14,1	0,0	-0,2
GC75	15,9	15,7	-0,1	-0,9	15,7	-0,2	-1,2
GC107	9,7	9,7	0,0	-0,4	9,6	-0,1	-1,5
GC64	12,2	12,1	-0,1	-0,5	12,1	-0,1	-0,7
GC01	11,3	11,2	-0,1	-0,6	11,4	0,1	0,7
GC58	10,1	10,1	0,0	0,3	10,1	0,0	-0,4
GC87	15,2	15,4	0,1	1,0	15,3	0,1	0,7
GC62	9,4	9,5	0,1	1,4	9,5	0,1	1,2
GC101	16,5	16,4	-0,1	-0,6	16,3	-0,1	-0,8
GA08	11,7	11,6	-0,1	-1,1	11,6	-0,1	-1,1
GC63	10,9	10,9	0,0	0,1	10,9	0,0	-0,2
GC91	22,8	22,8	0,0	0,0	22,6	-0,2	-0,8
GC29	8,5	8,3	-0,1	-1,6	8,3	-0,2	-2,0
GA14	10,7	10,5	-0,1	-1,2	10,6	-0,1	-0,9
GA16	12,0	11,9	0,0	-0,3	11,9	0,0	-0,2
GC106	11,3	11,4	0,0	0,4	11,3	0,0	-0,4
GA22	11,7	11,7	0,0	0,4	11,7	0,0	0,0
GC17	10,6	10,6	0,0	0,0	10,6	0,1	0,7
GA18	11,5	11,2	-0,2	-2,1	11,2	-0,3	-2,4
GC84	10,8	10,9	0,1	1,1	10,9	0,1	1,0
GC90	12,1	12,1	0,0	-0,4	12,0	-0,2	-1,3
GA02	12,3	12,3	0,0	0,4	12,4	0,2	1,3
GC12	11,5	11,4	-0,1	-1,0	11,4	-0,1	-0,6
GC86	15,4	15,3	0,0	-0,3	15,4	0,1	0,4
GC31	9,4	9,3	-0,1	-1,2	9,3	-0,2	-1,7
GC39	11,5	11,5	0,0	0,0	11,6	0,1	0,6

Amostra	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	CONCLUSÃO		
					Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GC44	15,6	15,6	-0,1	-0,5	15,6	-0,1	-0,5
GC98	9,0	9,2	0,2	2,7	9,1	0,2	2,1
GC65	12,1	12,2	0,1	0,7	12,2	0,1	0,8
GC102	10,3	10,5	0,2	2,3	10,4	0,2	1,8
GC96	11,0	11,1	0,0	0,3	11,0	-0,1	-0,5
GC05	12,2	12,3	0,1	1,1	12,4	0,2	1,5
GC77	10,2	10,2	0,0	0,0	10,1	0,0	-0,3
GC78	10,6	10,7	0,1	1,3	10,7	0,1	1,2
GA06	12,1	11,9	-0,3	-2,2	11,9	-0,3	-2,2
GC72	12,5	12,6	0,1	0,7	12,5	0,0	0,3
GC61	18,1	18,2	0,1	0,6	18,2	0,1	0,5
GC20	8,7	9,0	0,3	3,6	9,0	0,4	4,1
GC100	10,2	11,4	1,2	11,4	11,3	1,1	10,6
GC104	9,8	9,8	0,0	0,3	9,7	-0,1	-0,6
GC54	15,2	15,2	-0,1	-0,5	15,2	-0,1	-0,5
GC68	10,7	10,8	0,1	0,7	10,8	0,0	0,3
GC38	11,7	11,8	0,0	0,2	11,8	0,1	0,8
GC37	11,4	11,4	-0,1	-0,5	11,5	0,0	0,1
GC09	9,8	9,7	-0,1	-1,1	9,8	0,0	-0,4
GC48	10,5	10,4	0,0	-0,4	10,5	0,0	0,1
GA07	11,3	11,3	0,0	-0,3	11,3	0,0	-0,3
GC70	10,0	10,0	0,1	0,6	10,0	0,0	0,3
GC85	12,7	12,8	0,1	0,9	12,9	0,1	0,9
GC93	10,7	10,8	0,1	0,7	10,7	0,0	-0,1
GA12	10,3	10,3	0,1	0,5	10,4	0,1	0,7
GC07	12,0	11,9	-0,1	-0,6	12,0	0,0	-0,3
GA21	11,7	11,7	0,1	0,7	11,7	0,0	0,4
GC14	11,4	11,2	-0,2	-1,4	11,3	-0,1	-1,1
GC73	8,8	9,0	0,2	2,4	8,9	0,2	2,1
GC67	16,5	16,3	-0,2	-1,4	16,4	-0,1	-0,5
GA09	9,1	9,0	-0,1	-1,4	8,9	-0,2	-2,0
GA15	9,1	9,1	0,0	0,3	9,1	0,1	0,9
GC11	9,7	9,7	0,0	-0,3	9,7	0,0	0,1
GA17	11,0	10,9	0,0	-0,4	10,8	-0,1	-1,3
GC60	8,8	8,8	0,0	-0,4	8,8	-0,1	-0,6
GC46	12,3	12,5	0,2	1,2	12,5	0,2	1,7
GC13	11,3	11,1	-0,2	-1,8	11,2	-0,2	-1,3
GC57	11,5	11,6	0,1	0,7	11,7	0,1	1,3
GC89	9,9	9,8	-0,1	-0,5	9,7	-0,1	-1,3
GC95	11,4	11,5	0,1	1,3	11,5	0,1	0,6
GC53	17,0	16,9	-0,1	-0,4	17,0	0,0	-0,2
GC27	10,4	10,2	-0,3	-2,7	10,1	-0,3	-2,9
GC76	14,2	14,2	0,0	0,4	14,2	0,0	0,1
GC81	11,0	11,1	0,1	0,6	11,1	0,1	0,6

9 TEOR DE ISOPARAFÍNICOS(% v/v)

TABELA 9 – DESVIOS DE TREINAMENTO PLS E PCR

CONTINUA

Amostra	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GC25	16,8	16,8	0,0	0,0	16,8	0,0	0,0
GC59	23,1	23,1	0,0	-0,1	22,9	-0,2	-0,7
GC34	16,2	16,1	-0,1	-0,4	16,1	-0,1	-0,5
GC26	15,4	15,5	0,1	0,5	15,4	0,1	0,4
GA13	15,6	15,7	0,0	0,2	15,7	0,0	0,3
GC28	14,7	14,7	0,0	0,0	14,7	0,0	0,0
GC16	15,4	15,4	0,0	-0,1	15,4	-0,1	-0,4
GA01	16,4	16,3	-0,1	-0,4	16,3	-0,1	-0,4
GC10	16,8	16,6	-0,2	-1,0	16,6	-0,2	-0,9
GC35	16,6	16,6	0,0	-0,2	16,5	-0,1	-0,4
GC03	16,7	16,6	-0,1	-0,5	16,6	-0,1	-0,7
GC79	18,2	18,2	0,0	0,1	18,2	0,0	0,1
GC69	16,0	16,0	0,0	0,3	16,1	0,1	0,6
GC18	16,5	16,7	0,2	1,0	16,6	0,2	0,9
GA19	18,0	18,1	0,1	0,6	18,1	0,2	0,9
GC56	16,3	16,3	-0,1	-0,4	16,3	0,0	-0,1
GC80	15,6	15,6	0,0	0,1	15,6	0,0	0,1
GC74	15,8	15,7	-0,1	-0,5	15,7	0,0	-0,3
GC99	24,4	24,6	0,1	0,6	24,5	0,1	0,5
GC47	16,2	16,4	0,2	1,3	16,5	0,3	1,6
GC42	14,4	14,4	0,0	-0,1	14,3	-0,1	-0,7
GC75	16,3	16,3	0,0	0,3	16,5	0,2	1,0
GC107	19,1	18,9	-0,1	-0,7	18,9	-0,2	-0,9
GC64	16,8	16,6	-0,2	-0,9	16,6	-0,2	-1,3
GC01	16,2	16,0	-0,1	-0,8	15,9	-0,2	-1,4
GC58	15,4	15,3	-0,1	-0,8	15,3	-0,1	-0,6
GC87	13,3	13,8	0,5	4,0	14,2	1,0	7,3
GC62	14,3	14,3	0,0	-0,1	14,3	0,0	0,0
GC101	15,6	15,7	0,0	0,2	15,4	-0,2	-1,2
GA08	16,8	16,6	-0,2	-1,0	16,6	-0,2	-1,1
GC63	16,3	16,1	-0,3	-1,7	16,1	-0,3	-1,8
GC91	18,7	18,9	0,2	1,2	18,7	0,1	0,4
GC29	12,3	12,2	-0,1	-1,0	12,2	-0,1	-1,1
GA14	16,6	16,6	-0,1	-0,4	16,5	-0,1	-0,5
GA16	17,2	17,2	0,0	0,1	17,2	0,0	0,3
GC106	19,3	19,2	-0,1	-0,4	19,2	-0,1	-0,5
GA22	17,8	17,7	-0,1	-0,5	17,7	-0,1	-0,4
GC17	16,2	16,2	0,0	-0,1	16,2	0,0	-0,2
GA18	15,2	15,0	-0,2	-1,2	14,9	-0,3	-1,7
GC84	16,4	16,4	0,0	0,1	16,4	0,0	0,1
GC90	19,5	19,6	0,1	0,3	19,6	0,1	0,4
GA02	19,0	19,0	0,0	0,2	19,1	0,1	0,5
GC12	15,9	15,8	-0,1	-0,8	15,8	-0,1	-0,9
GC86	15,3	15,3	0,0	0,1	15,0	-0,2	-1,4
GC31	15,1	14,9	-0,2	-1,0	15,0	-0,1	-0,9
GC39	16,6	16,7	0,1	0,7	16,6	0,1	0,4

Amostra	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	CONCLUSÃO		
					Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GC44	18,7	18,7	0,0	-0,1	18,7	0,0	-0,2
GC98	11,7	12,2	0,4	3,6	12,2	0,5	4,2
GC65	16,5	16,4	-0,1	-0,5	16,5	0,0	-0,3
GC102	17,8	18,0	0,1	0,7	18,0	0,2	1,1
GC96	16,1	16,1	0,1	0,4	16,1	0,1	0,3
GC05	15,7	15,8	0,1	0,9	16,0	0,3	2,2
GC77	13,4	13,6	0,2	1,4	13,7	0,3	2,3
GC78	14,7	14,8	0,1	1,0	14,9	0,2	1,4
GA06	16,3	16,2	-0,1	-0,5	16,2	-0,1	-0,7
GC72	13,9	13,9	0,0	0,1	13,9	0,1	0,6
GC61	18,6	19,0	0,4	2,2	19,2	0,6	3,1
GC20	13,8	13,9	0,1	0,5	13,8	0,0	0,1
GC100	18,5	18,2	-0,2	-1,3	18,2	-0,2	-1,3
GC104	18,3	18,4	0,0	0,1	18,4	0,0	0,1
GC54	17,7	17,8	0,1	0,8	17,8	0,2	0,9
GC68	16,1	16,1	0,0	-0,2	16,1	0,0	-0,1
GC38	16,0	16,1	0,1	0,8	16,1	0,1	0,6
GC37	15,6	15,5	-0,1	-0,9	15,5	-0,2	-1,0
GC09	13,9	14,1	0,2	1,2	14,0	0,1	0,8
GC48	14,9	15,0	0,0	0,2	14,9	0,0	0,0
GA07	16,1	16,0	-0,1	-0,4	16,0	-0,1	-0,5
GC70	14,5	14,5	0,0	0,2	14,5	0,1	0,5
GC85	17,7	17,6	0,0	-0,2	17,7	0,0	-0,1
GC93	18,0	17,8	-0,2	-1,2	17,8	-0,2	-1,2
GA12	16,5	16,5	0,0	0,2	16,5	0,0	0,2
GC07	16,7	16,6	-0,1	-0,8	16,6	-0,1	-0,5
GA21	17,6	17,6	0,0	-0,2	17,6	0,0	-0,1
GC14	18,0	17,8	-0,2	-1,0	17,7	-0,3	-1,5
GC73	13,9	13,9	0,0	0,2	13,9	0,0	0,3
GC67	13,9	13,6	-0,3	-1,9	13,3	-0,5	-3,9
GA09	14,7	14,7	0,0	-0,1	14,7	0,0	-0,2
GA15	12,1	12,2	0,1	1,0	12,2	0,1	0,6
GC11	15,6	15,4	-0,2	-1,3	15,3	-0,3	-1,6
GA17	15,8	15,7	-0,1	-0,7	15,7	-0,1	-0,3
GC60	13,5	13,4	-0,1	-0,4	13,5	0,0	0,0
GC46	16,3	16,4	0,1	0,6	16,5	0,2	1,2
GC13	16,9	16,7	-0,2	-1,1	16,6	-0,2	-1,3
GC57	16,2	16,3	0,1	0,6	16,3	0,1	0,8
GC89	16,5	16,5	0,1	0,4	16,4	0,0	-0,1
GC95	18,5	18,6	0,1	0,5	18,6	0,1	0,4
GC53	18,2	18,4	0,1	0,8	18,4	0,2	1,1
GC27	15,0	14,8	-0,1	-1,0	14,8	-0,2	-1,1
GC76	18,0	18,2	0,1	0,8	18,2	0,2	1,0
GC81	17,7	17,6	0,0	-0,2	17,6	-0,1	-0,6

10 TEOR DE NAFTÊNICOS (% v/v)

TABELA 10 – DESVIOS DE TREINAMENTO PLS E PCR

CONTINUA

Amostra	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GC25	13,5	13,4	0,0	-0,2	14,0	0,5	4,1
GC59	27,5	27,6	0,1	0,3	28,7	1,1	4,1
GC34	13,3	13,3	0,0	0,0	13,1	-0,2	-1,3
GC26	12,3	12,1	-0,2	-1,7	12,0	-0,2	-1,7
GA13	14,0	14,0	0,0	-0,1	14,1	0,1	0,8
GC28	12,1	11,9	-0,2	-1,7	11,9	-0,2	-1,3
GC16	12,4	12,3	0,0	-0,3	12,7	0,4	3,1
GA01	13,6	13,4	-0,2	-1,8	13,8	0,1	1,0
GC10	15,5	15,3	-0,3	-1,8	15,7	0,2	1,3
GC35	12,5	12,6	0,1	1,1	12,5	0,0	0,0
GC03	13,9	13,6	-0,2	-1,6	13,9	0,0	0,0
GC79	14,0	14,3	0,3	2,2	13,5	-0,5	-3,5
GC69	14,7	14,7	0,0	0,2	14,6	-0,1	-0,5
GC18	14,0	13,8	-0,2	-1,2	14,2	0,3	1,9
GA19	14,4	14,4	0,0	-0,1	13,7	-0,7	-4,6
GC56	15,1	15,0	-0,1	-0,6	14,5	-0,5	-3,4
GC80	14,0	14,2	0,2	1,7	14,1	0,1	0,5
GC74	38,8	38,8	0,0	-0,1	38,8	0,0	0,0
GC99	17,8	18,3	0,6	3,2	20,5	2,7	15,3
GC47	14,5	14,6	0,1	1,0	14,5	0,0	0,3
GC42	31,3	30,9	-0,4	-1,2	29,7	-1,6	-5,3
GC75	27,0	27,1	0,1	0,5	28,1	1,1	4,1
GC107	12,8	12,9	0,1	1,1	11,9	-0,9	-7,2
GC64	13,2	13,1	-0,1	-0,6	13,0	-0,2	-1,7
GC01	12,9	12,8	-0,1	-0,6	12,8	-0,1	-1,1
GC58	14,3	14,0	-0,3	-2,1	13,1	-1,2	-8,4
GC87	22,6	21,2	-1,4	-6,3	21,6	-1,0	-4,4
GC62	13,4	13,1	-0,3	-2,2	12,5	-0,9	-6,6
GC101	46,2	46,4	0,1	0,3	45,5	-0,7	-1,5
GA08	13,3	13,1	-0,1	-1,1	13,5	0,2	1,7
GC63	14,5	14,1	-0,4	-2,6	13,5	-1,1	-7,3
GC91	27,2	27,8	0,6	2,2	29,5	2,3	8,4
GC29	10,4	10,1	-0,3	-2,7	10,3	-0,2	-1,6
GA14	12,7	12,9	0,2	1,4	12,7	0,0	0,1
GA16	15,4	15,3	-0,1	-0,4	15,1	-0,3	-1,9
GC106	13,8	13,9	0,1	1,0	13,1	-0,7	-5,4
GA22	13,7	13,8	0,1	0,7	13,7	0,0	0,1
GC17	14,2	13,9	-0,2	-1,6	14,1	0,0	-0,3
GA18	14,6	15,2	0,6	4,4	15,2	0,6	4,4
GC84	12,8	13,0	0,2	1,5	13,1	0,3	2,6
GC90	16,4	16,3	-0,1	-0,6	15,5	-0,9	-5,4
GA02	16,9	16,4	-0,5	-2,8	15,2	-1,7	-9,9
GC12	12,7	12,6	-0,1	-0,8	13,0	0,3	2,1
GC86	40,5	40,6	0,1	0,3	39,7	-0,8	-2,0
GC31	11,7	11,6	-0,1	-0,5	11,7	0,0	-0,4
GC39	13,1	13,2	0,1	0,8	13,1	0,0	-0,2

Amostra	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	CONCLUSÃO		
					Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GC44	10,0	10,3	0,4	3,7	10,7	0,8	7,6
GC98	10,8	11,2	0,4	3,7	11,5	0,7	6,1
GC65	15,7	15,4	-0,3	-1,8	15,0	-0,7	-4,3
GC102	13,7	13,7	0,1	0,5	12,6	-1,0	-7,5
GC96	11,5	11,9	0,4	3,3	12,0	0,5	4,2
GC05	27,0	26,2	-0,8	-3,1	26,2	-0,8	-3,0
GC77	12,7	13,0	0,3	2,2	12,9	0,2	1,8
GC78	13,9	14,0	0,1	1,0	13,9	0,0	0,1
GA06	13,5	13,4	-0,1	-0,4	13,5	0,1	0,6
GC72	23,7	23,2	-0,5	-2,0	23,6	0,0	-0,2
GC61	20,6	20,0	-0,5	-2,6	20,7	0,1	0,7
GC20	11,1	11,0	-0,1	-1,1	11,5	0,4	3,5
GC100	14,4	14,3	-0,1	-0,8	13,5	-0,9	-6,3
GC104	13,2	13,3	0,0	0,3	12,4	-0,9	-6,5
GC54	10,0	10,4	0,4	3,5	10,6	0,6	5,6
GC68	15,0	15,0	0,0	0,1	14,8	-0,2	-1,6
GC38	13,9	14,1	0,2	1,2	14,4	0,5	3,5
GC37	13,6	13,7	0,2	1,2	14,2	0,6	4,7
GC09	11,3	11,2	-0,1	-0,8	11,6	0,4	3,3
GC48	13,4	13,7	0,4	2,7	13,6	0,2	1,7
GA07	13,2	13,0	-0,1	-1,0	13,3	0,1	1,0
GC70	14,0	14,0	0,0	-0,1	13,6	-0,4	-2,5
GC85	23,7	23,2	-0,5	-2,0	22,8	-0,9	-3,7
GC93	13,1	13,5	0,4	2,7	13,2	0,1	0,5
GA12	12,3	12,4	0,1	1,1	12,2	-0,1	-1,2
GC07	15,9	15,7	-0,2	-1,4	16,3	0,4	2,8
GA21	13,7	13,8	0,2	1,2	13,7	0,0	0,3
GC14	10,8	10,7	-0,1	-0,7	11,4	0,5	5,0
GC73	13,1	13,4	0,2	1,9	13,4	0,2	1,8
GC67	43,0	43,8	0,8	1,8	43,3	0,3	0,6
GA09	12,1	11,7	-0,3	-2,7	11,9	-0,2	-1,5
GA15	10,6	10,9	0,3	2,9	11,2	0,6	5,6
GC11	11,7	11,7	0,0	-0,2	11,8	0,1	0,9
GA17	15,1	15,0	-0,1	-0,7	15,0	-0,1	-0,7
GC60	12,8	12,6	-0,1	-1,1	12,2	-0,6	-4,8
GC46	11,5	12,0	0,6	4,8	12,6	1,2	10,1
GC13	14,7	14,4	-0,3	-1,7	14,7	0,0	-0,1
GC57	14,5	14,7	0,2	1,3	14,4	-0,2	-1,1
GC89	11,9	12,1	0,2	1,3	12,2	0,3	2,1
GC95	13,9	13,9	0,0	0,1	13,8	-0,1	-0,4
GC53	20,0	20,2	0,2	1,0	21,0	1,0	4,8
GC27	12,4	12,4	0,0	-0,1	12,4	0,1	0,7
GC76	12,5	12,7	0,2	1,6	13,2	0,6	4,9
GC81	13,5	13,7	0,2	1,7	14,3	0,8	6,0

11 TEOR DE OLEFÍNICOS(% v/v)

TABELA 11 – DESVIOS DE TREINAMENTO PLS E PCR

CONTINUA

Amostra	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GC25	15,5	15,7	0,1	1,0	15,8	0,2	1,6
GC59	1,9	1,9	0,0	0,5	1,9	-0,1	-4,3
GC34	16,5	16,6	0,1	0,7	16,6	0,1	0,4
GC26	18,4	18,1	-0,3	-1,4	18,1	-0,3	-1,4
GA13	14,6	14,7	0,0	0,2	14,5	-0,1	-0,7
GC28	16,7	15,5	-1,2	-7,4	14,6	-2,1	-12,6
GC16	15,4	15,0	-0,4	-2,7	14,8	-0,6	-3,9
GA01	15,3	14,8	-0,5	-3,2	15,1	-0,3	-1,8
GC10	14,3	14,3	0,1	0,5	14,6	0,3	2,2
GC35	16,6	16,8	0,2	1,4	16,9	0,3	1,6
GC03	15,8	15,7	-0,1	-0,6	16,1	0,2	1,5
GC79
GC69	12,2	12,7	0,4	3,5	12,5	0,3	2,5
GC18	15,5	15,4	-0,1	-0,5	15,7	0,2	1,5
GA19	11,9	12,4	0,5	3,9	12,6	0,6	5,4
GC56	14,2	14,1	-0,1	-0,6	14,2	0,0	0,3
GC80	14,7	15,3	0,6	3,8	15,0	0,3	2,0
GC74	2,2	1,5	-0,7	-30,7	1,4	-0,8	-34,9
GC99	2,7	1,9	-0,8	-29,8	1,7	-1,0	-37,4
GC47	14,6	14,4	-0,2	-1,1	14,4	-0,2	-1,4
GC42	3,6	5,3	1,7	46,9	7,4	3,8	105,1
GC75	3,3	2,3	-0,9	-29,1	2,4	-0,8	-25,4
GC107	12,5	14,5	2,0	16,1	14,5	2,0	16,0
GC64	14,0	13,6	-0,4	-2,9	13,6	-0,4	-2,6
GC01	15,1	14,8	-0,3	-1,8	16,3	1,2	8,0
GC58	16,2	16,5	0,3	1,6	16,1	-0,1	-0,4
GC87	0,3	0,2	-0,1	-35,8	1,1	0,8	228,9
GC62	13,3	13,2	-0,1	-1,0	13,2	-0,1	-0,7
GC101	0,5	0,7	0,2	51,1	0,0	-0,4	-90,6
GA08	16,0	15,9	-0,1	-0,4	16,0	0,0	-0,1
GC63	15,1	15,4	0,4	2,4	15,6	0,5	3,5
GC91	1,4	1,5	0,1	7,9	0,3	-1,1	-78,3
GC29	11,6	10,6	-0,9	-8,1	10,0	-1,5	-13,1
GA14	16,7	16,5	-0,2	-0,9	16,5	-0,2	-1,1
GA16	13,4	13,2	-0,2	-1,7	13,1	-0,3	-2,0
GC106	14,3	15,0	0,6	4,5	14,9	0,6	3,8
GA22	12,4	13,1	0,7	5,4	13,0	0,6	4,7
GC17	15,5	15,3	-0,2	-1,1	15,7	0,2	1,0
GA18	13,8	14,0	0,2	1,1	13,7	-0,1	-0,5
GC84	10,4	11,0	0,7	6,6	10,9	0,6	5,4
GC90	11,4	11,9	0,5	4,3	12,0	0,6	5,1
GA02	14,2	13,9	-0,3	-2,0	15,5	1,3	9,3
GC12	17,0	17,1	0,1	0,5	17,1	0,1	0,5
GC86	1,7	2,4	0,7	40,0	2,6	0,9	53,1
GC31	19,2	18,4	-0,8	-4,3	18,0	-1,2	-6,0
GC39	15,1	15,5	0,4	2,6	15,8	0,7	4,9

Amostra	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	CONCLUSÃO		
					Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GC44	13,4	13,2	-0,1	-1,1	13,5	0,1	0,6
GC98	11,7	11,1	-0,6	-5,3	10,1	-1,6	-13,8
GC65	13,3	13,6	0,3	2,3	14,3	1,0	7,9
GC102	13,8	13,5	-0,3	-2,1	13,2	-0,6	-4,1
GC96	11,4	11,6	0,2	1,8	10,8	-0,6	-5,0
GC05	5,5	5,8	0,4	6,5	8,3	2,8	51,3
GC77	16,3	16,1	-0,2	-1,2	15,5	-0,8	-4,8
GC78	11,6	12,3	0,7	5,8	12,3	0,7	6,1
GA06	15,0	14,9	-0,1	-0,7	14,6	-0,4	-2,9
GC72	3,6	3,0	-0,6	-16,3	3,0	-0,6	-15,9
GC61	7,2	6,8	-0,5	-6,5	7,2	-0,1	-0,8
GC20	12,5	12,6	0,1	0,4	12,3	-0,2	-1,3
GC100	14,6	15,0	0,4	2,6	14,9	0,3	2,1
GC104	16,3	16,6	0,3	1,8	16,3	-0,1	-0,4
GC54	13,6	13,5	-0,1	-0,4	13,7	0,2	1,3
GC68	12,3	12,9	0,5	4,3	12,8	0,4	3,6
GC38	13,5	13,7	0,2	1,3	13,8	0,2	1,8
GC37	13,0	13,3	0,3	2,3	13,2	0,3	2,0
GC09	12,8	12,5	-0,3	-2,3	12,5	-0,3	-2,2
GC48	11,5	11,2	-0,3	-2,6	11,4	-0,2	-1,4
GA07	16,0	15,3	-0,7	-4,5	15,1	-0,9	-5,6
GC70	13,2	13,7	0,6	4,2	13,3	0,1	0,9
GC85	7,8	8,1	0,3	4,3	8,4	0,6	7,5
GC93	12,3	12,5	0,3	2,2	11,9	-0,3	-2,7
GA12	17,0	16,5	-0,5	-2,9	16,4	-0,6	-3,6
GC07	13,4	13,4	0,0	0,1	13,7	0,3	2,5
GA21	12,4	12,9	0,5	4,1	12,8	0,4	3,1
GC14	15,4	15,7	0,3	2,0	15,8	0,4	2,5
GC73	10,6	10,7	0,0	0,1	10,3	-0,3	-2,8
GC67	1,5	1,6	0,2	12,3	2,4	0,9	62,8
GA09	16,9	15,8	-1,1	-6,6	15,3	-1,6	-9,7
GA15	10,0	9,8	-0,2	-1,9	10,0	0,0	-0,1
GC11	17,8	17,8	0,0	0,2	17,5	-0,2	-1,4
GA17	13,9	13,7	-0,2	-1,5	13,4	-0,5	-3,9
GC60	12,5	12,2	-0,4	-3,0	12,1	-0,5	-3,8
GC46	14,7	13,8	-0,9	-5,9	13,8	-0,8	-5,6
GC13	14,6	14,9	0,3	2,1	15,2	0,6	3,8
GC57	13,5	13,1	-0,4	-3,0	13,4	-0,1	-0,4
GC89	11,5	11,9	0,4	3,7	11,1	-0,4	-3,5
GC95	12,3	12,6	0,3	2,6	12,1	-0,2	-1,8
GC53	6,6	6,2	-0,4	-5,4	6,2	-0,3	-5,0
GC27	16,0	14,7	-1,3	-8,1	14,1	-2,0	-12,2
GC76	12,2	12,3	0,1	0,8	11,5	-0,7	-5,7
GC81	11,9	12,6	0,7	6,2	12,4	0,6	4,8

12 TEOR DE OXIGENADOS (% v/v)

TABELA 12 – DESVIOS DE TREINAMENTO PLS E PCR

Amostra	CONTINUA						
	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GC25	23,7	23,7	0,0	0,0	23,7	0,0	-0,1
GC59	25,1	25,4	0,3	1,0	25,7	0,6	2,2
GC34	24,1	23,9	-0,1	-0,6	24,1	0,1	0,2
GC26	23,7	23,6	-0,2	-0,7	23,7	0,0	0,1
GA13	25,6	25,9	0,2	0,9	25,9	0,3	1,2
GC28	27,9	27,9	0,1	0,2	28,4	0,5	1,7
GC16	28,3	28,5	0,2	0,7	29,0	0,7	2,4
GA01	24,3	24,2	-0,1	-0,2	24,3	0,0	0,0
GC10	23,5	23,5	-0,1	-0,3	23,5	0,0	0,1
GC35	24,1	23,9	-0,2	-0,8	24,1	0,0	0,2
GC03	23,7	23,6	-0,1	-0,4	23,8	0,0	0,2
GC79	24,5	21,7	-2,7	-11,1	21,0	-3,5	-14,2
GC69	26,0	25,9	-0,1	-0,4	25,4	-0,7	-2,5
GC18	24,0	24,0	0,0	-0,1	24,1	0,0	0,2
GA19	24,1	24,3	0,2	0,7	24,1	0,0	-0,1
GC56	24,1	24,1	0,1	0,3	24,3	0,3	1,1
GC80	25,8	25,7	-0,1	-0,5	25,6	-0,3	-1,0
GC74	23,3	23,3	0,0	0,2	23,5	0,3	1,2
GC99	20,1	20,5	0,4	2,0	20,2	0,1	0,6
GC47	23,7	23,8	0,1	0,2	23,7	0,0	0,1
GC42	25,0	24,7	-0,3	-1,3	25,1	0,1	0,5
GC75	26,5	26,8	0,3	1,0	26,3	-0,2	-0,8
GC107	19,8	19,8	0,0	0,1	19,3	-0,5	-2,4
GC64	26,7	26,9	0,1	0,5	27,0	0,3	1,0
GC01	23,0	22,7	-0,3	-1,2	23,3	0,2	1,1
GC58	24,0	23,9	-0,1	-0,3	23,7	-0,2	-1,0
GC87	35,8	36,0	0,1	0,4	34,4	-1,4	-3,9
GC62	30,9	30,9	0,0	0,0	31,0	0,1	0,2
GC101	19,0	19,0	0,0	-0,1	20,8	1,8	9,3
GA08	24,3	24,0	-0,3	-1,3	23,8	-0,5	-2,1
GC63	24,0	23,9	-0,2	-0,7	23,7	-0,3	-1,4
GC91	23,6	23,8	0,3	1,2	25,1	1,6	6,6
GC29	43,1	43,3	0,3	0,6	43,6	0,6	1,3
GA14	23,6	23,7	0,1	0,4	23,9	0,3	1,2
GA16	24,0	24,1	0,1	0,4	24,3	0,2	1,0
GC106	19,1	19,3	0,2	0,9	19,0	-0,1	-0,5
GA22	24,7	24,6	-0,1	-0,3	24,2	-0,5	-1,9
GC17	24,9	24,6	-0,3	-1,1	24,8	-0,1	-0,2
GA18	23,5	23,5	0,0	0,1	24,3	0,8	3,3
GC84	32,3	32,3	-0,1	-0,2	32,0	-0,4	-1,2
GC90	19,0	19,3	0,3	1,4	18,9	0,0	-0,2
GA02	18,3	18,4	0,1	0,5	18,4	0,2	0,9
GC12	24,2	24,2	0,0	0,0	24,3	0,2	0,7
GC86	24,0	23,9	-0,2	-0,6	25,1	1,1	4,5
GC31	23,6	23,4	-0,2	-0,9	23,1	-0,5	-2,2
GC39	25,1	24,9	-0,2	-0,8	25,0	0,0	-0,2

Amostra	Valor experimental (%)	Valor previsto PLS (%)	Desvio absoluto PLS	Desvio relativo PLS (%)	CONCLUSÃO		
					Valor previsto PCR (%)	Desvio absoluto PCR	Desvio relativo PCR (%)
GC44	24,4	24,7	0,3	1,3	24,9	0,5	2,2
GC98	40,4	40,1	-0,3	-0,7	39,7	-0,7	-1,8
GC65	23,9	23,7	-0,1	-0,5	23,3	-0,5	-2,3
GC102	23,8	23,9	0,1	0,6	23,6	-0,2	-0,8
GC96	31,0	31,1	0,1	0,3	30,9	-0,1	-0,4
GC05	20,6	20,4	-0,3	-1,2	19,5	-1,1	-5,5
GC77	25,2	25,1	-0,1	-0,4	24,7	-0,5	-1,8
GC78	29,3	29,3	0,0	0,1	28,9	-0,4	-1,3
GA06	25,7	25,8	0,2	0,7	26,2	0,5	2,0
GC72	36,0	36,0	0,1	0,1	35,6	-0,3	-0,9
GC61	23,9	24,0	0,0	0,1	23,3	-0,6	-2,6
GC20	37,2	37,3	0,0	0,1	37,7	0,5	1,4
GC100	19,3	21,7	2,5	12,7	21,0	1,7	8,8
GC104	19,1	19,0	0,0	-0,2	18,7	-0,4	-1,9
GC54	24,5	24,6	0,1	0,4	24,5	0,0	0,1
GC68	26,0	25,9	-0,1	-0,2	25,5	-0,4	-1,7
GC38	27,8	27,8	0,0	-0,1	27,9	0,0	0,2
GC37	29,8	29,7	-0,1	-0,2	29,8	0,1	0,3
GC09	36,3	36,5	0,1	0,4	37,0	0,6	1,7
GC48	34,2	34,2	0,0	0,0	34,3	0,1	0,4
GA07	26,7	26,7	0,0	0,0	26,8	0,1	0,5
GC70	29,1	29,0	0,0	0,0	28,7	-0,3	-1,1
GC85	24,5	24,6	0,1	0,4	24,3	-0,1	-0,5
GC93	25,8	25,9	0,1	0,3	25,6	-0,3	-1,0
GA12	24,2	24,1	-0,1	-0,3	24,3	0,1	0,4
GC07	23,3	23,3	0,0	0,2	23,2	-0,1	-0,3
GA21	25,1	25,1	-0,1	-0,2	24,6	-0,5	-2,0
GC14	26,0	26,0	0,0	0,1	26,2	0,2	0,9
GC73	36,5	36,2	-0,2	-0,7	35,8	-0,7	-1,8
GC67	22,0	21,8	-0,2	-0,8	23,8	1,8	8,1
GA09	27,7	27,5	-0,2	-0,6	27,3	-0,3	-1,2
GA15	45,6	45,3	-0,3	-0,6	45,3	-0,3	-0,7
GC11	25,7	25,5	-0,2	-0,7	25,9	0,3	1,0
GA17	23,2	23,2	0,0	0,2	22,9	-0,2	-0,9
GC60	34,6	34,8	0,2	0,5	34,7	0,1	0,3
GC46	24,9	24,9	0,0	-0,1	24,7	-0,2	-0,8
GC13	24,4	24,5	0,1	0,4	24,7	0,3	1,2
GC57	26,6	26,4	-0,2	-0,6	26,3	-0,2	-0,9
GC89	32,1	32,1	0,0	0,0	32,0	-0,1	-0,2
GC95	24,2	24,3	0,1	0,3	23,9	-0,3	-1,3
GC53	25,8	26,0	0,2	0,9	26,0	0,3	1,1
GC27	27,9	28,2	0,3	1,0	28,6	0,7	2,6
GC76	27,4	27,4	0,0	0,1	26,9	-0,5	-1,8
GC81	26,1	26,0	0,0	0,0	26,2	0,1	0,5

APÊNDICE D – IDENTIFICAÇÃO DE COMPOSTOS PRESENTES NA GASOLINA

Espectros de massas produzidos pelas técnicas de ionização por impacto de elétrons e ionização química.

ÍNDICE

Isobutano.....	269
But-1-eno.....	271
Butano.....	273
(E)-But-2-eno.....	275
2,2-Dimetilpropano.....	277
(Z)-But-2-eno.....	278
Etanol.....	280
3-metil-but-1-eno.....	282
2-metilbutano.....	284
Pent-1-eno.....	286
2-metilbut-1-eno.....	288
Pentano.....	290
2-metilbuta-1,3-dieno.....	292
(E)-Pent-2-eno.....	294
(Z)-Pent-2-eno.....	296
2-metilbut-2-eno.....	298
(Z)-Penta-1,3-dieno.....	300
(Z)-Penta-1,2-dieno.....	302
2,2-dimetilbutano.....	304
Ciclopenteno.....	306
4-metilpent-1-eno.....	308
3-metilpent-1-eno.....	311
Ciclopentano.....	314
2,3-dimetilbutano.....	316
4-metilpent-2-eno.....	319
2-metilpentano.....	321
Desconhecido 1.....	324
3-metilpentano.....	326
2-metilpent-1-eno.....	328
Hex-1-eno.....	330
2-etilbut-1-eno.....	332
Hexano.....	334
(Z)-Hex-3-eno.....	336
(E)-Hex-3-eno.....	338
(E)-Hex-2-eno.....	340
2-metilpent-2-eno.....	342
4-metilciclopenteno.....	344
(E)-3-metilpent-2-eno.....	346
3-metilciclopenteno.....	348
(Z)-Hex-2-eno.....	350
(Z)-3-metilpent-2-eno.....	352
2,3-dimetilbuta-1,3-dieno.....	354
2,2-dimetilpentano.....	355
Metilciclopentano.....	357
2,4-dimetilpentano.....	359
Desconhecido 2.....	361
Cicloexa-1,3-dieno.....	363
2,2,3-trimetilbutano.....	365

Metilciclopenta-1,3-dieno	367
Hexa-1,4-dieno	369
3,5-dimetilciclopenteno	370
Desconhecido 3	372
1-metilciclopenteno	373
Benzeno	375
3-etilpent-1-eno	377
(Z)-2-metilhex-3-eno	378
Tiofeno	379
3,3-dimetilpentano	380
5-metilex-1-eno	381
Cicloexano	382
Desconhecido 4	384
Hexa-2,4-dieno	386
2,3-dimetilpenta-1,3-dieno	388
4-metilex-2-eno	390
2-metilexano	392
2,3-dimetilpentano	394
1,1-dimetilciclopentano	396
Cicloexeno	398
3-metilexano	400
(Z)-1,2-dimetilciclopentano	402
(Z)-1,3-dimetilciclopentano	404
(E)-1,3-dimetilciclopentano	406
3-etilpentano	408
(E)-1,2-dimetilciclopentano	410
Hept-1-eno	412
Desconhecido 5	414
3-metilex-2-eno	415
2,4-dimetilpenta-1,4-dieno	417
Heptano	419
3-metilex-3-eno	420
(E)-3-metilex-2-eno	422
(E)-hept-2-eno	424
1,1-dietilciclopropano	426
4-metilexa-1,4-dieno	428
2,3-dimetilpent-2-eno	430
3-etilciclopenteno	432
(Z)-1,2-dimetilciclopentano	434
Metilcicloexano	436
1,1,3-trimetilciclopentano	438
1,1-dietoxietano	440
Desconhecido 6	442
Desconhecido 7	444
Etilciclopentano	446
2,5-dimetilexano	449
3-metilcicloexeno	450
2,4-dimetilexano	452
Desconhecido 8	453
(1Z,2E,4Z)-1,2,4-trimetilciclopentano	454

3,3-dimetilexano	456
5,5-dimetilciclopenta-1,3-dieno.....	457
Desconhecido 9.....	461
1-etilciclopenteno	463
Tolueno	465
Desconhecido 10.....	467
Desconhecido 11.....	469
1,1,2-trimetilciclopentano	470
Desconhecido 12.....	471
2,3-dimetilexano	473
3-etil-2-metilpentano.....	474
Desconhecido 13.....	475
2-metileptano.....	477
4-metileptano.....	478
3,4-dimetilexano	479
Desconhecido 14.....	480
Desconhecido 15.....	482
3-metileptano.....	483
(Z)-1,3-dimetilcicloexano	484
(E)-1,4-dimetilcicloexano	488
1,1-dimetilcicloexano	490
Desconhecido 16.....	492
Desconhecido 17.....	493
(E)-1-etil-3-metilciclopentano.....	494
(Z)-1-etil-3-metilciclopentano.....	496
(E)-1-etil-2-metilciclopentano.....	498
1-etil-1-metilciclopentano.....	499
Oct-1-eno	500
(E)-1,2-dimetilcicloexano	501
Desconhecido 18.....	503
Desconhecido 19.....	505
(1Z,2Z,3Z)-1,2,3-trimetilciclopentano	507
Octano.....	508
Desconhecido 20.....	509
Desconhecido 21.....	511
Desconhecido 22.....	513
Isopropilciclopentano.....	515
(Z)-Oct-2-eno.....	517
Desconhecido 23.....	518
Desconhecido 24.....	520
(Z)-1-etil-2-metilciclopentano.....	521
Desconhecido 25.....	523
2,2-dimetileptano	525
Desconhecido 26.....	526
(Z)-1,2-dimetilcicloexano	528
2,4-dimetileptano	530
Propilciclopentano	531
Etilcicloexano	533
4-etil-2-metilexano.....	535
Desconhecido 27.....	536

Desconhecido 28.....	539
1,1,3-trimetilcicloexano.....	540
2,5-dimetileptano.....	542
Desconhecido 29.....	543
Desconhecido 30.....	544
Desconhecido 31.....	545
Etilbenzeno.....	546
Desconhecido 32.....	549
(1 <i>Z</i> ,2 <i>E</i> ,4 <i>E</i>)-1,2,4-trimetilcicloexano.....	551
1,3-dimetilbenzeno.....	553
1,4-dimetilbenzeno.....	556
2,3-dimetileptano.....	559
3,4-dimetileptano.....	560
Desconhecido 33.....	561
3-etil-3-metilexano.....	562
4-metiloctano.....	563
2-metiloctano.....	564
Desconhecido 34.....	565
Desconhecido 35.....	566
Desconhecido 36.....	567
3-etileptano.....	568
1,2-dimetilbenzeno.....	569
1,1,2-trimetilcicloexano.....	572
(<i>E</i>)-1-etil-4-metilcicloexano.....	573
(<i>Z</i>)-1-etil-4-metilcicloexano.....	575
Nonano.....	577
1-metil-2-propilciclopentano.....	578
Desconhecido 37.....	580
Isopropilbenzeno.....	581
Desconhecido 38.....	584
Desconhecido 39.....	587
Desconhecido 40.....	590
Desconhecido 41.....	591
Isopropilcicloexano.....	592
Desconhecido 42.....	595
2,2-dimetiloctano.....	596
Desconhecido 43.....	597
Desconhecido 44.....	598
2,6-dimetiloctano.....	599
Propilbenzeno.....	600
Desconhecido 45.....	603
1-etil-3-metilbenzeno.....	604
1-etil-4-metilbenzeno.....	607
Desconhecido 46.....	610
1,3,5-trimetilbenzeno.....	611
Desconhecido 47.....	614
5-metilnonano.....	615
2-etil-1-metilbenzeno.....	616
2-metilnonano.....	619
Desconhecido 48.....	620

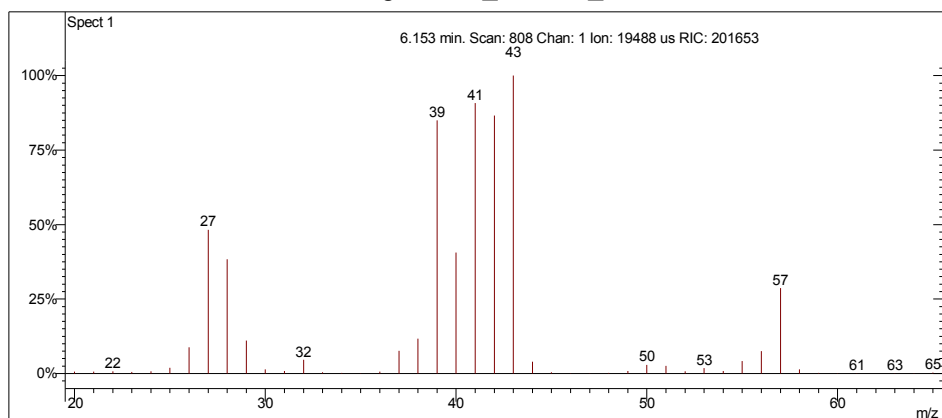
3-metilnonano.....	621
1,2,4-trimetilbenzeno.....	622
Isobutilcicloexano.....	625
Desconhecido 49.....	626
Desconhecido 50.....	627
Sec-butilbenzeno.....	628
Decano.....	630
1,2,3-trimetilbenzeno.....	631
3-isopropil-1-metilbenzeno.....	634
4-isopropil-1-metilbenzeno.....	637
2,3-diidroindeno.....	640
Desconhecido 51.....	643
sec-butilcicloexano.....	644
Desconhecido 52.....	645
1,3-dietilbenzeno.....	646
1-metil-3-propilbenzeno.....	649
1,4-dietilbenzeno.....	652
Butilbenzeno.....	655
5-etil-1,3-dimetilbenzeno.....	658
1,2-dietilbenzeno.....	661
Desconhecido 53.....	664
1-metil-4-propilbenzeno.....	665
Desconhecido 54.....	668
2-etil-1,4-dimetilbenzeno.....	669
4-etil-1,3-dimetilbenzeno.....	672
4-etenil-1,3-dimetilbenzeno.....	675
4-etil-1,2-dimetilbenzeno.....	677
2-etil-1,3-dimetilbenzeno.....	680
Desconhecido 55.....	683
Desconhecido 56.....	684
Desconhecido 57.....	687
Desconhecido 58.....	690
Undecano.....	691
1-etil-4-isopropilbenzeno.....	692
1,2,4,5-tetrametilbenzeno.....	695
1,2,3,5-tetrametilbenzeno.....	698
3-metilbutilbenzeno.....	701
Desconhecido 59.....	703
Desconhecido 60.....	706
Desconhecido 61.....	709
Desconhecido 62.....	712
Desconhecido 63.....	715
Desconhecido 64.....	718
1,2,3,4-tetraidronaftaleno.....	721
Pentilbenzeno.....	724
Desconhecido 65.....	727
Desconhecido 66.....	730
Desconhecido 67.....	733
Desconhecido 66.....	736
Desconhecido 69.....	739

Naftaleno.....	741
Desconhecido 70.....	743
Desconhecido 71.....	744
Desconhecido 72.....	746
Desconhecido 73.....	749
Desconhecido 74.....	750
Desconhecido 75.....	753
Desconhecido 76.....	756
Desconhecido 77.....	759
Desconhecido 78.....	762
Desconhecido 79.....	765
Desconhecido 80.....	768
Dodecano.....	771
Desconhecido 81.....	772
Desconhecido 82.....	774
Desconhecido 83.....	776
Desconhecido 84.....	778
Desconhecido 85.....	781
Desconhecido 86.....	784
Desconhecido 87.....	787
Desconhecido 88.....	789
Desconhecido 89.....	791
Desconhecido 90.....	794
Desconhecido 91.....	796
Desconhecido 92.....	798
Desconhecido 93.....	801
Desconhecido 94.....	803
Desconhecido 95.....	804
Desconhecido 96.....	805
Desconhecido 97.....	807
2-metilnaftaleno.....	809
Desconhecido 98.....	811
Desconhecido 99.....	812
1-metilnaftaleno.....	813
Tridecano.....	815
Desconhecido 100.....	816
Desconhecido 101.....	818
2,6-dimetilnaftaleno.....	820
2,7-dimetilnaftaleno.....	822
Tetradecano.....	824
1,3-dimetilnaftaleno.....	825
1,2-dimetilnaftaleno.....	827

Isobutano

Amostra de Gasolina Comum

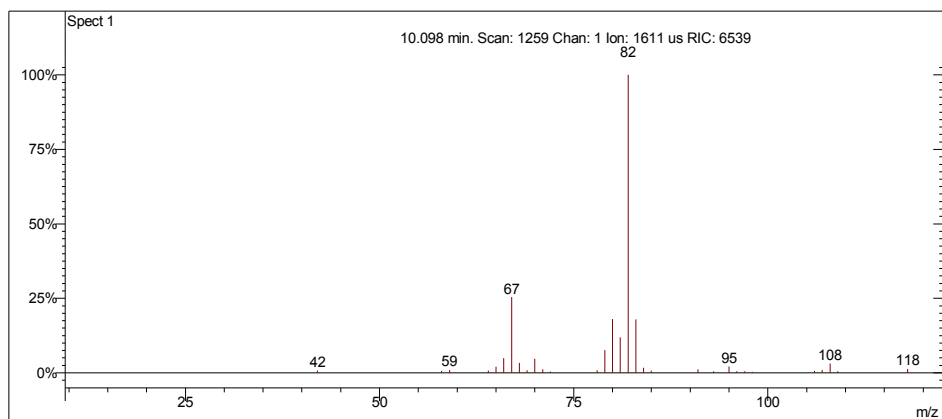
Scan 808 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_10;52;54 am.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_10;52;54 am.sms
Scan No: 808, Time: 6.153 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 6.153 min. Scan: 808 Chan: 1 Ion: 19488 us RIC: 201653
Pair Count: 119 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 150

Ionização Química com Acetonitrila

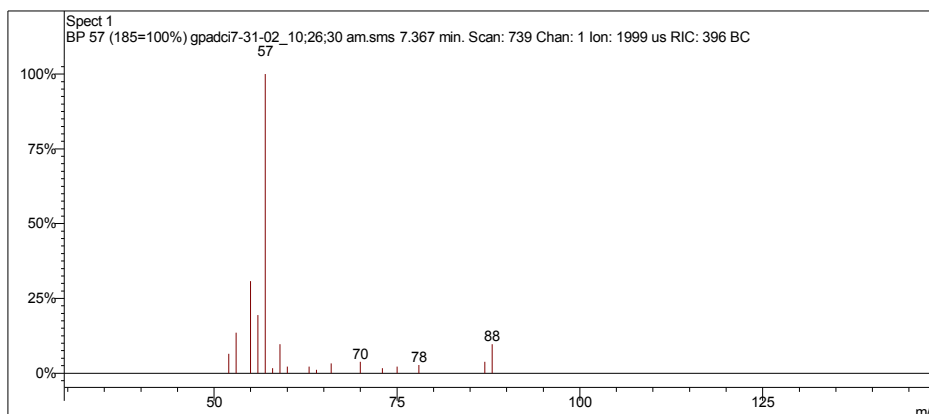
Scan 1259 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 1259, Time: 10.098 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 10.098 min. Scan: 1259 Chan: 1 Ion: 1611 us RIC: 6539
Pair Count: 33 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 739 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 739, Time: 7.367 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 7.367 min. Scan: 739 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 396 BC
Pair Count: 17 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
58 (ausente)	$[M]^+ = C_4H_{10}^+$	Íon molecular com baixa intensidade indicando cadeia linear.
57	$[M - 1]^+ = C_4H_9^+$	Perda de hidrogênio.
43	$[M - 15]^+ = C_3H_7^+$	Perda de metila. Pico base.
41	$C_3H_5^+$	Rearranjos de hidrogênio podem ocorrer para a formação do carbocátion.
39	$C_3H_3^+$	Rearranjos de hidrogênio.

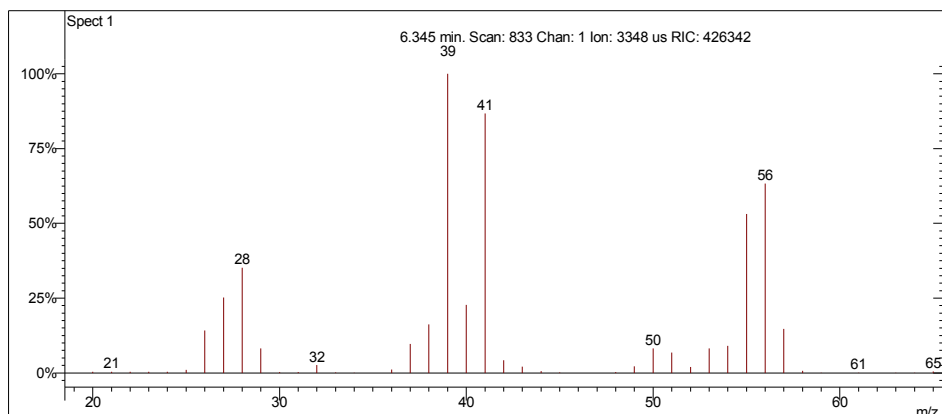
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
Sem sinal		Acetonitrila
Íons 82 e 67 são provenientes de background, prováveis contaminantes.		
$[M - 1]^+ = 57$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^+ = CH_2OH^+ + \cdot H$ $CH_2OH^+ + C_4H_{10} = C_4H_9^+ + CH_3OH$		

But-1-eno

Amostra de Gasolina Comum

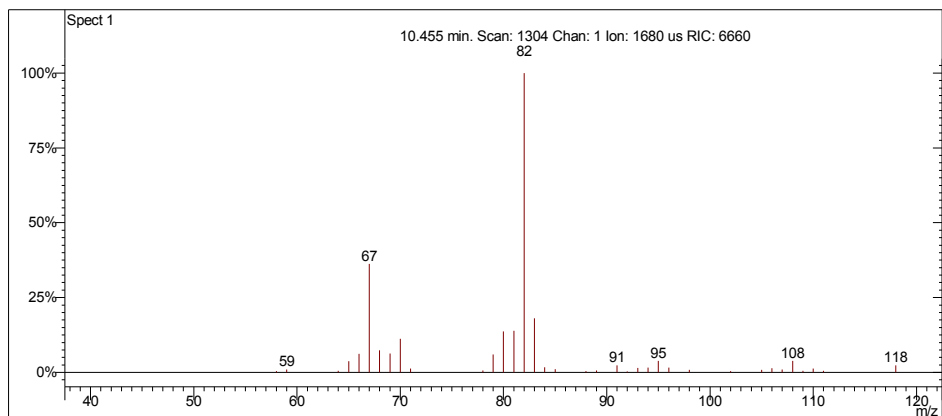
Scan 833 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_10;52;54 am.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_10;52;54 am.sms
Scan No: 833, Time: 6.345 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 6.345 min. Scan: 833 Chan: 1 Ion: 3348 us RIC: 426342
Pair Count: 81 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 150

Ionização Química com Acetonitrila

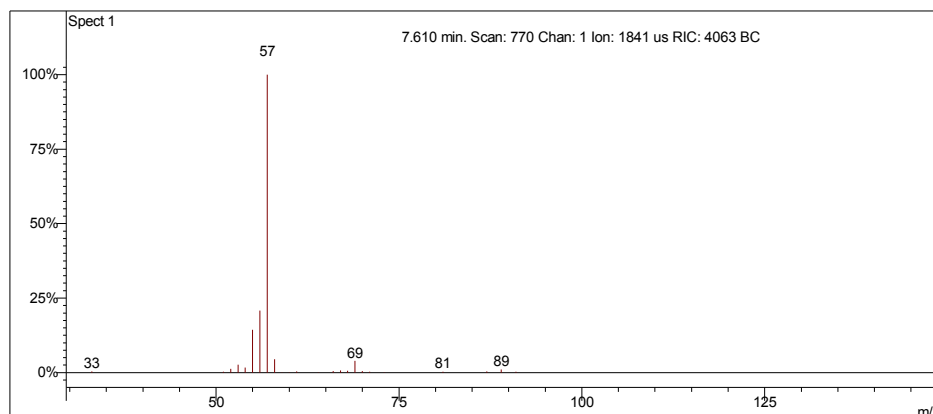
Scan 1304 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciact_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciact_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 1304, Time: 10.455 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 10.455 min. Scan: 1304 Chan: 1 Ion: 1680 us RIC: 6660
Pair Count: 39 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 770 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 770, Time: 7.610 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 7.610 min. Scan: 770 Chan: 1 Ion: 1841 us RIC: 4063 BC
 Pair Count: 24 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
56	$[M]^+ = C_4H_8^+$	Íon molecular. Alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
55	$[M - 1]^+ = C_4H_7^+$	Perda de hidrogênio.
41	$[M - 15]^+ = C_3H_5^+$	Perda de metila. Forma carbocátion estabilizado por ressonância.
39	$C_3H_3^+$	Rearranjos de hidrogênio para formação do carbocátion.

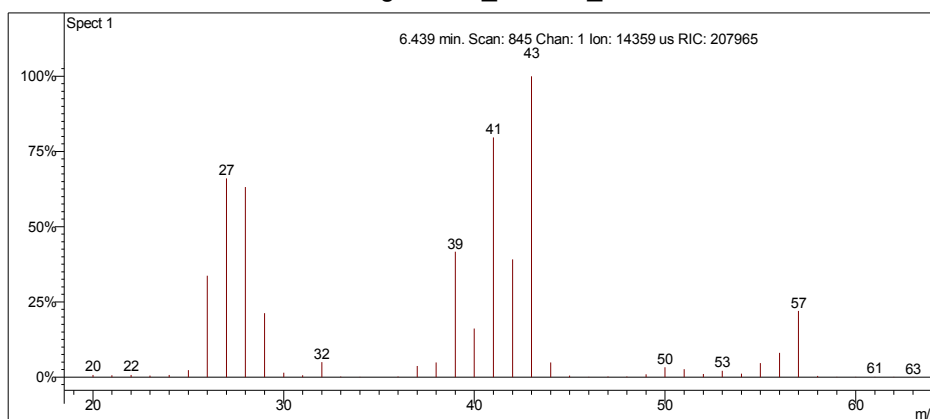
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
sem sinal		Acetonitrila
Íons 82 e 67 são provenientes de background, prováveis contaminantes.		
$[M+1]^+ = 57$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^+ + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_4H_8 = C_4H_9^+ + CH_3OH$		

Butano

Amostra de Gasolina Comum

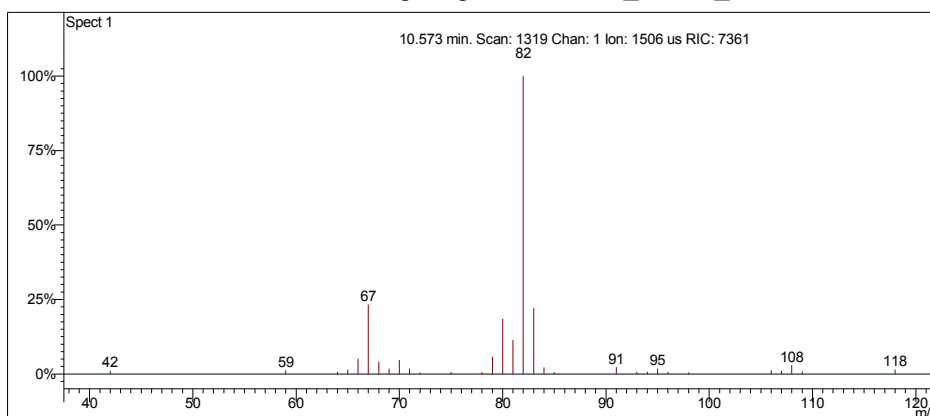
Scan 845 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_10;52;54 am.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_10;52;54 am.sms
Scan No: 845, Time: 6.439 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 6.439 min. Scan: 845 Chan: 1 Ion: 14359 us RIC: 207965
Pair Count: 113 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 150

Ionização Química com Acetonitrila

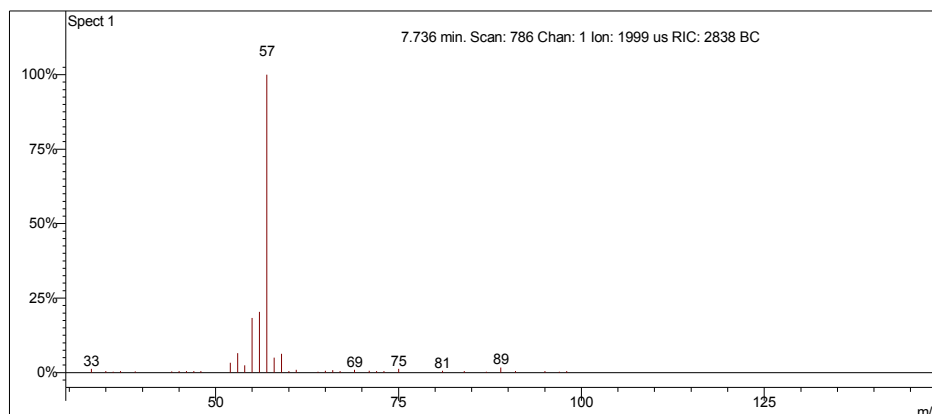
Scan 1319 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciact_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciact_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 1319, Time: 10.573 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 10.573 min. Scan: 1319 Chan: 1 Ion: 1506 us RIC: 7361
Pair Count: 32 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 786 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 786, Time: 7.736 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 7.736 min. Scan: 786 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 2838 BC
 Pair Count: 37 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
58 (ausente)	$[M]^{++} = C_4H_{10}^+$	Íon molecular ausente indica molécula linear.
57	$[M - 1]^+ = C_4H_9^+$	Perda de hidrogênio.
43	$[M - 15]^+ = C_3H_7^+$	Perda de metila (pico base).
41	$C_3H_5^+$	Forma carbocátion.
39	$C_3H_3^+$	Fragmentação alílica com rearranjos de hidrogênio para formação do carbocátion.

Interpretação Ionização Química

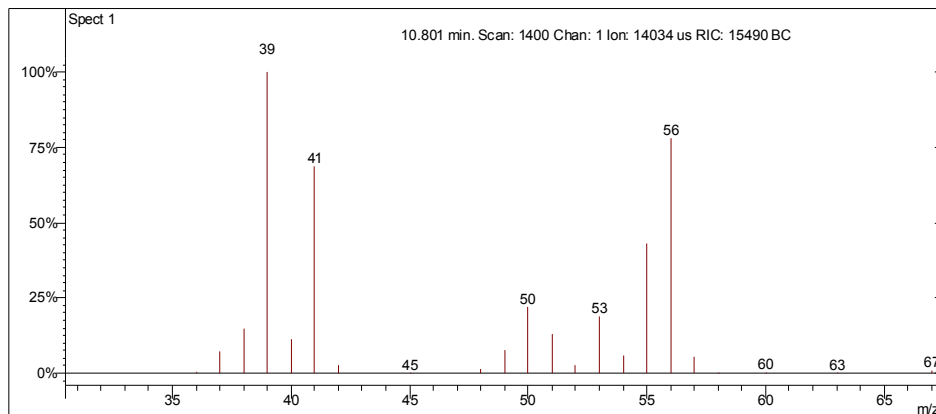
Íon m/z	Reação	Substância
sem sinal		Acetonitrila
Íons 82 e 67 são provenientes de background, prováveis contaminantes.		
$[M - 1]^+ = 57$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{++} = CH_2OH^+ + \cdot H$ $CH_2OH^+ + C_4H_{10} = C_4H_9^+ + CH_3OH$		

(E)-But-2-eno

Coelui com Desconhecido.

Amostra de Gasolina Comum

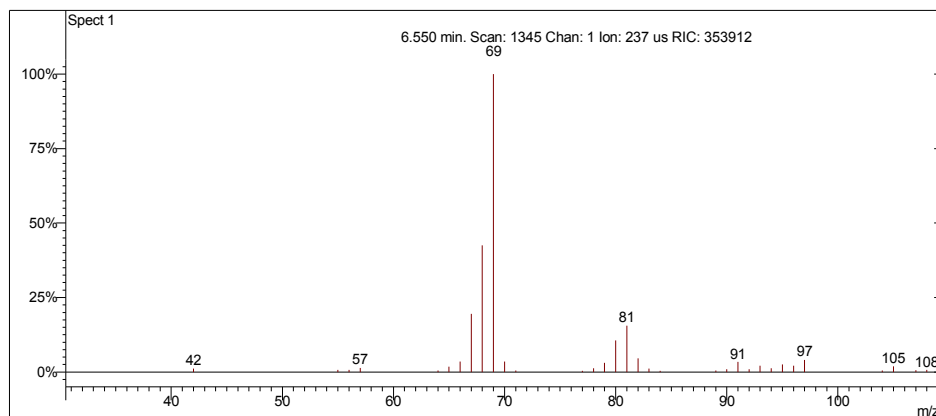
Scan 1400 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 1400, Time: 10.801 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 10.801 min. Scan: 1400 Chan: 1 Ion: 14034 us RIC: 15490 BC
Pair Count: 58 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

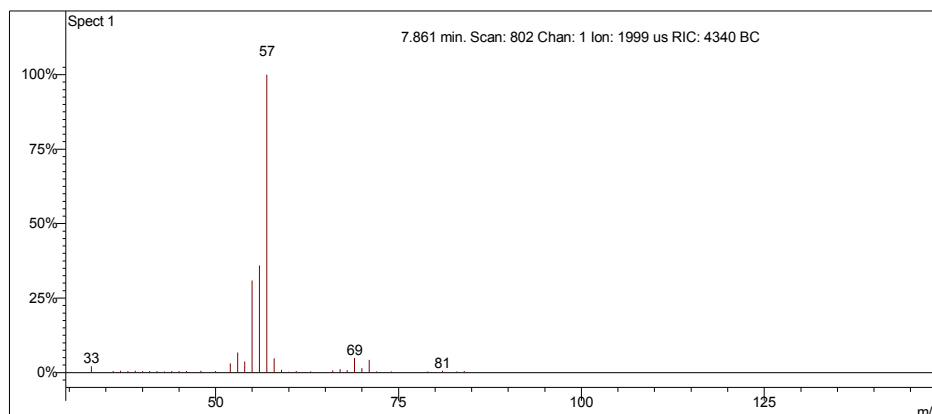
Scan 1345 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms
Scan No: 1345, Time: 6.550 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 6.550 min. Scan: 1345 Chan: 1 Ion: 237 us RIC: 353912
Pair Count: 39 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 150

Ionização Química com Metanol

Scan 802 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 802, Time: 7.861 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 7.861 min. Scan: 802 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 4340 BC
 Pair Count: 39 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
56	$[M]^{++} = C_4H_8^+$	Íon molecular com alta intensidade. Indica molécula com ressonância ou cíclica.
55	$[M - 1]^+ = C_4H_7^+$	Perda de hidrogênio.
41	$[M - 15]^+ = C_3H_5^+$	Perda de metila.
39	$C_3H_3^+$	Pico base. Rearranjos de hidrogênio para formação do carbocátion.

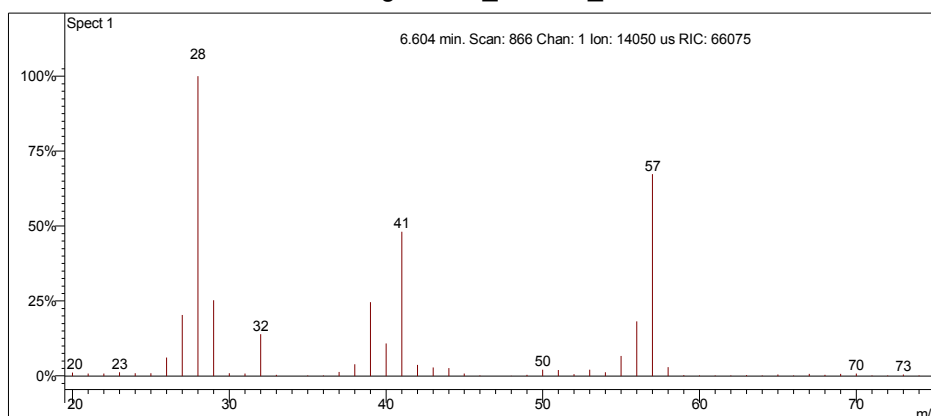
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
Sem sinal		Acetonitrila
Identificado outro composto coeluido.		
$[M+1]^+ = 57$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_4H_8 = C_4H_9^+ + CH_3OH$		

2,2-Dimetilpropano (Neopentano)

Amostra de Gasolina Comum

Scan 866 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_10;52;54 am.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_10;52;54 am.sms
Scan No: 866, Time: 6.604 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 6.604 min. Scan: 866 Chan: 1 Ion: 14050 us RIC: 66075
Pair Count: 109 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 150

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Quantidade desprezível.

Interpretação do Fragmentograma

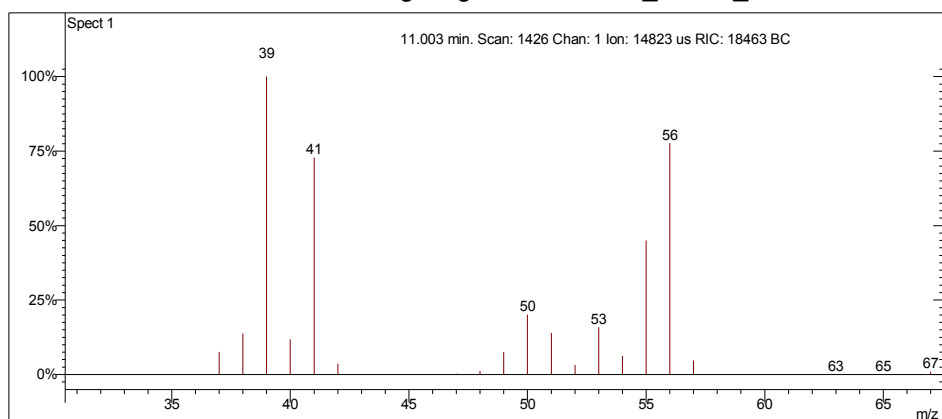
Íon m/z	Fragmento	Observação
72 (ausente)	$[M]^{+•} = C_5H_{12}^{+}$	Íon molecular ausente indica molécula linear.
57	$[M - 15]^+ = C_4H_9^+$	Clivagem na ramificação com perda de metila (pico base).
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação com rearranjos de hidrogênio para formação do carbocátion.
39	$C_3H_3^+$	Fragmentação com rearranjos de hidrogênio para formação do carbocátion.
28	$C_2H_4^+$	Fragmentação com rearranjos de hidrogênio para formação do carbocátion.

(Z)-But-2-eno

Coelui com Desconhecido.

Amostra de Gasolina Comum

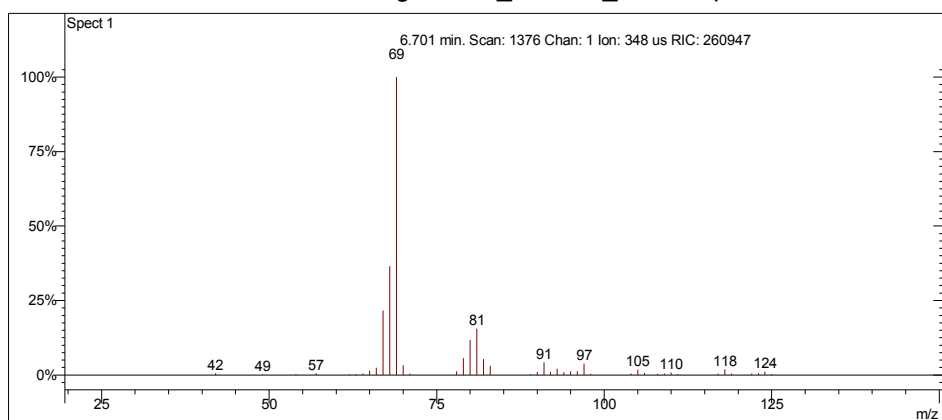
Scan 1426 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 1426, Time: 11.003 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 11.003 min. Scan: 1426 Chan: 1 Ion: 14823 us RIC: 18463 BC
Pair Count: 62 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

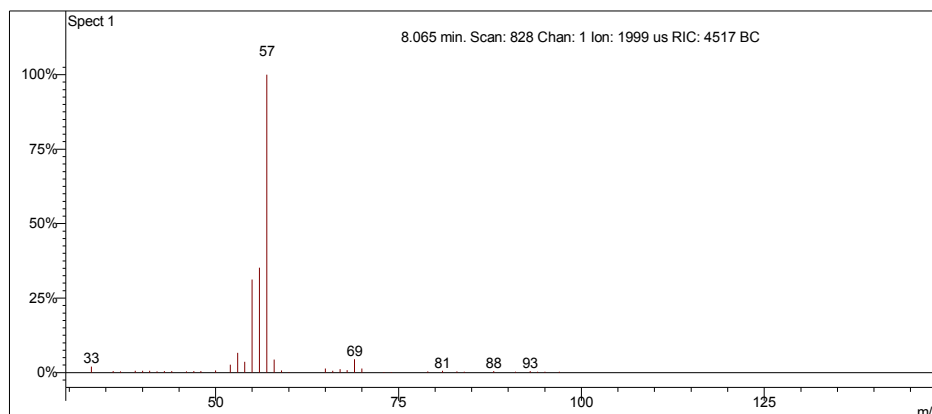
Scan 1376 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms
Scan No: 1376, Time: 6.701 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 6.701 min. Scan: 1376 Chan: 1 Ion: 348 us RIC: 260947
Pair Count: 44 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 150

Ionização Química com Metanol

Scan 828 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 828, Time: 8.065 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 8.065 min. Scan: 828 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 4517 BC
 Pair Count: 40 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
56	$[M]^+ = C_4H_8^+$	Alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
55	$[M - 1]^+ = C_4H_7^+$	Perda de hidrogênio.
41	$[M - 15]^+ = C_3H_5^+$	Perda de metila.
39	$C_3H_3^+$	Rearranjos de hidrogênio para formação do carbocátion.

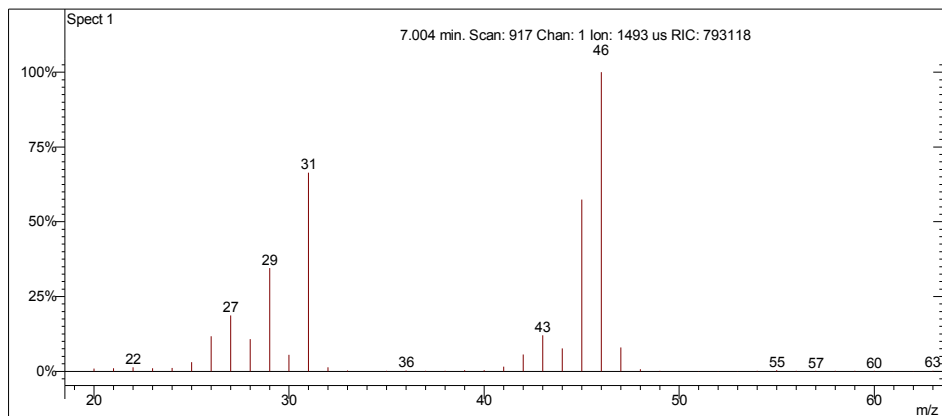
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
Sem sinal		Acetonitrila
Identificado outro composto coeluido.		
$[M+1]^+ = 57$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^+ + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_4H_8 = C_4H_9^+ + CH_3OH$		

Etanol

Amostra de Gasolina Comum

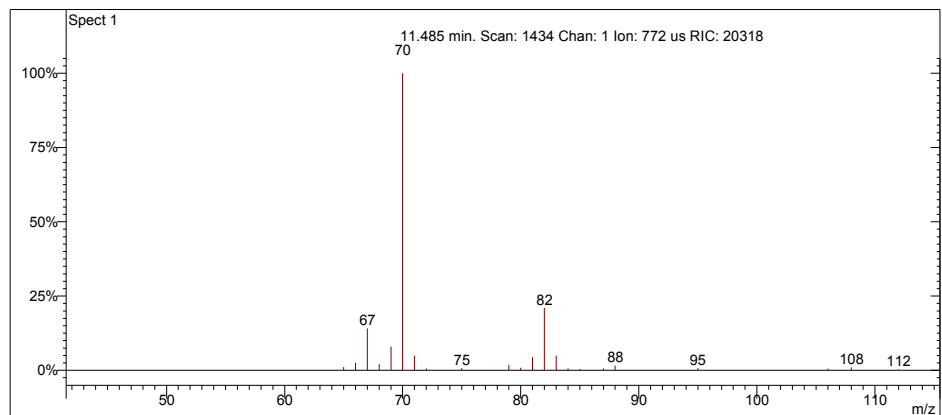
Scan 917 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_10;52;54 am.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_10;52;54 am.sms
Scan No: 917, Time: 7.004 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 7.004 min. Scan: 917 Chan: 1 Ion: 1493 us RIC: 793118
Pair Count: 60 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 150

Ionização Química com Acetonitrila

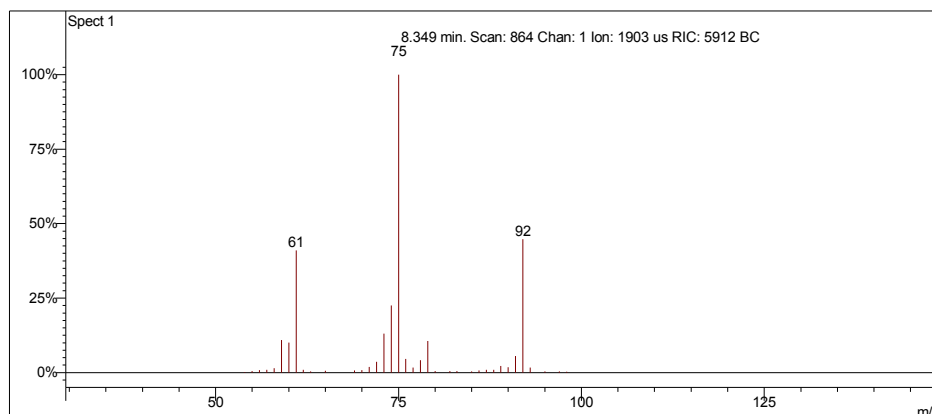
Scan 1434 from c:\... \espectrometria\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 1434, Time: 11.485 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 11.485 min. Scan: 1434 Chan: 1 Ion: 772 us RIC: 20318
Pair Count: 22 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 864 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 864, Time: 8.349 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 8.349 min. Scan: 864 Chan: 1 Ion: 1903 us RIC: 5912 BC
Pair Count: 37 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
46	$[M]^{+} = C_2H_6O^{+}$	Presença acentuada íon molecular.
45	$[M - 1]^{+} = C_2H_5O^{+}$	Perda de hidrogênio.
31	$[M - 15]^{+} = CH_3O^{+}$	Perda de metila. Fragmento característico indicando composto com oxigênio.
28	$[M - 18]^{+} = CH_3O^{+}$	Desidratação. Perda de água (característico de álcoois).

Interpretação Ionização Química

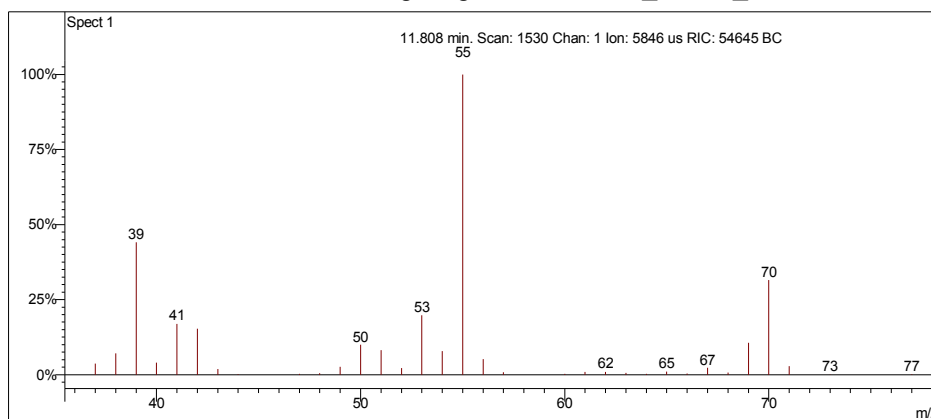
Íon m/z	Reação	Substância
70	Complexos estabilizados por colisão.	Acetonitrila
$CH_2CN^{+} + C_2H_6O = (CN:C_2H_3OH)^{+} + CH_4$		
75	Complexos estabilizados por colisão.	Metanol
$CH_2OH^{+} + C_2H_6O = (CH_2OH:C_2H_3OH)^{+} + H_2$		

3-metil-but-1-eno

Coelui com etanol.

Amostra de Gasolina Comum

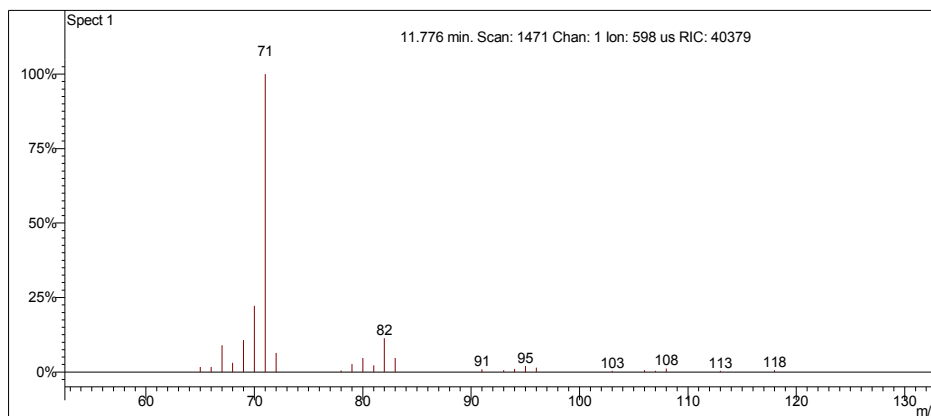
Scan 1530 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 1530, Time: 11.808 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 11.808 min. Scan: 1530 Chan: 1 Ion: 5846 us RIC: 54645 BC
Pair Count: 50 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

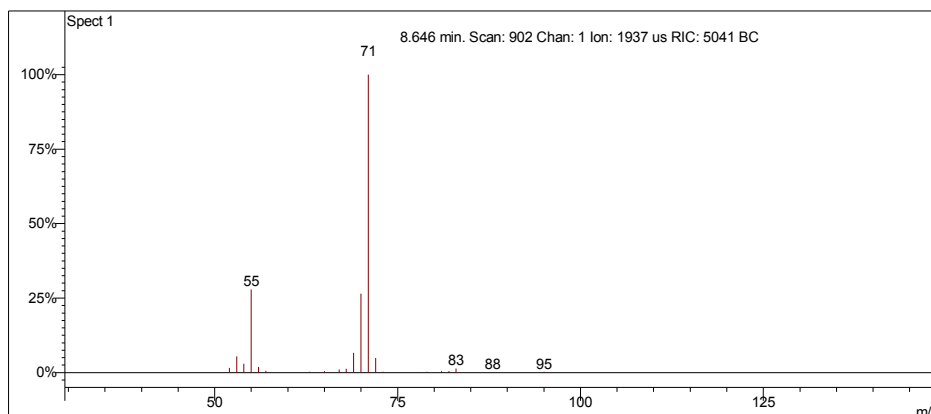
Scan 1471 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 1471, Time: 11.776 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 11.776 min. Scan: 1471 Chan: 1 Ion: 598 us RIC: 40379
Pair Count: 25 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 902 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 902, Time: 8.646 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 8.646 min. Scan: 902 Chan: 1 Ion: 1937 us RIC: 5041 BC
Pair Count: 23 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
70	$[M]^{+} = C_5H_{10}^{+}$	Alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
69	$[M - 1]^{+} = C_5H_9^{+}$	Perda de hidrogênio.
55	$[M - 15]^{+} = C_4H_7^{+}$	Perda de metila. Pico base.
41	$[M - 29]^{+} = C_3H_5^{+}$	Fragmentação no carbono beta. Perda de C_2H_5 . Forma carbocátion estabilizado por ressonância.

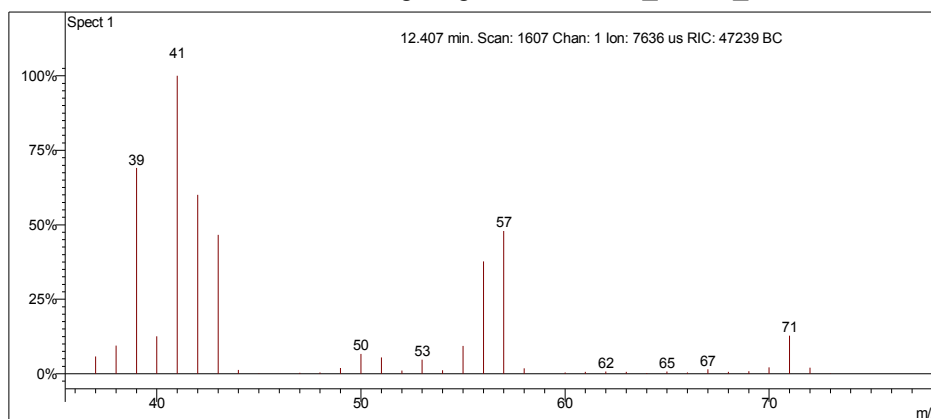
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 71$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_5H_{10} = C_5H_{11}^{+} + CH_3CN$		
$[M+1]^{+} = 71$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{+} + CH_3OH = CH_3OH_2^{+} + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^{+} + C_5H_{10} = C_5H_{11}^{+} + CH_3OH$		

2-metilbutano (Isopentano)

Amostra de Gasolina Comum

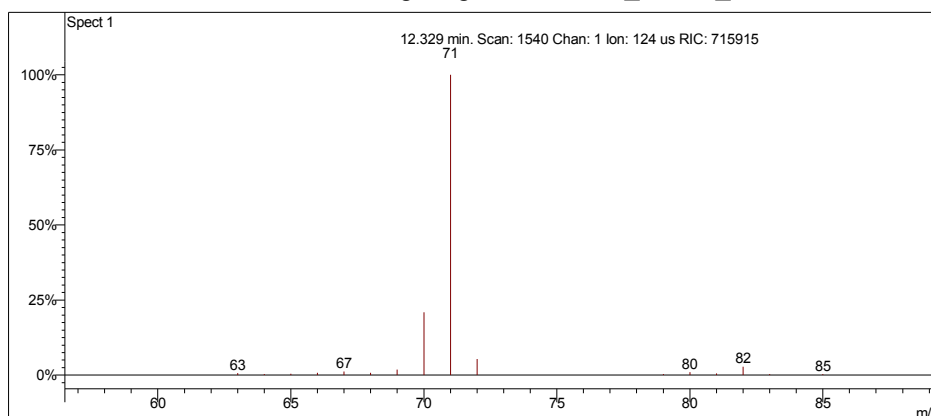
Scan 1607 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 1607, Time: 12.407 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 12.407 min. Scan: 1607 Chan: 1 Ion: 7636 us RIC: 47239 BC
Pair Count: 46 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

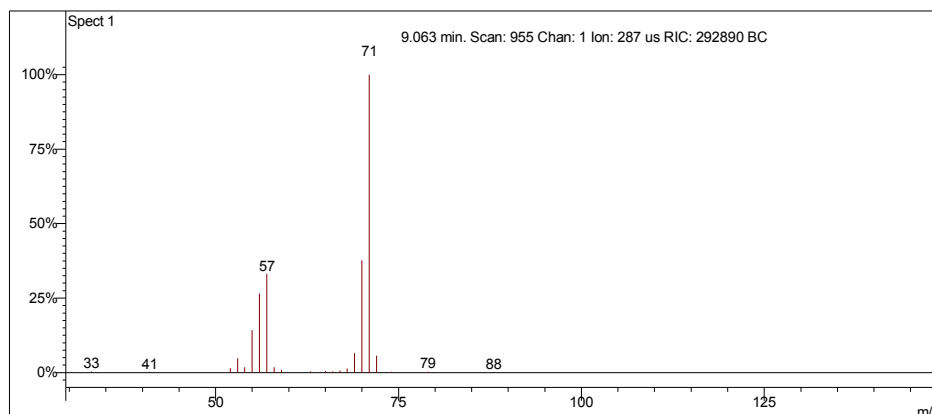
Scan 1540 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 1540, Time: 12.329 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 12.329 min. Scan: 1540 Chan: 1 Ion: 124 us RIC: 715915
Pair Count: 18 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 955 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 955, Time: 9.063 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 9.063 min. Scan: 955 Chan: 1 Ion: 287 us RIC: 292890 BC
 Pair Count: 23 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
72	$[M]^{+} = C_5H_{12}^{+}$	Íon molecular com baixa intensidade indica molécula linear.
71	$[M - 1]^{+} = C_5H_9^{+}$	Perda de hidrogênio.
57	$[M - 15]^{+} = C_4H_9^{+}$	Perda de metila.
43	$[M - 29]^{+} = C_3H_7^{+}$	Perda de C_2H_5 (etila).
41	$C_3H_5^{+}$	Fragmentação alílica com rearranjo de hidrogênio.

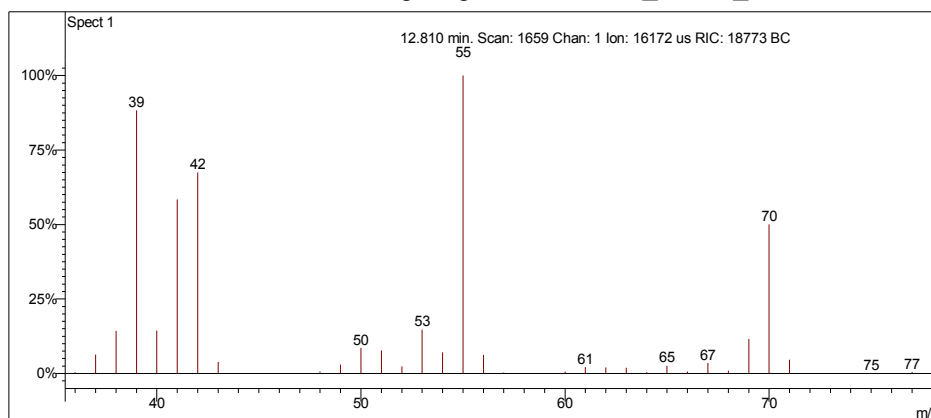
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M - 1]^{+} = 71$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} = CH_2CN^{+} + \cdot H$ $CH_2CN^{+} + C_5H_{12} = C_5H_{11}^{+} + CH_3CN$		
$[M - 1]^{+} = 71$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{+} = CH_2OH^{+} + \cdot H$ $CH_2OH^{+} + C_5H_{12} = C_5H_{11}^{+} + CH_3OH$		

Pent-1-eno

Amostra de Gasolina Comum

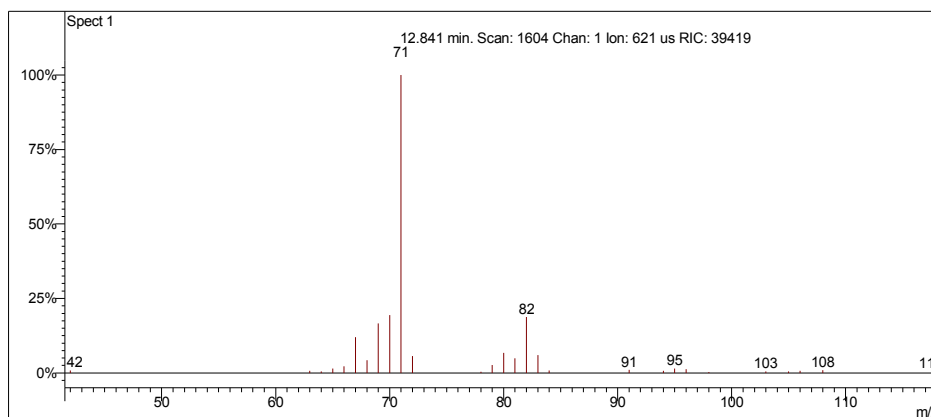
Scan 1659 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 1659, Time: 12.810 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 12.810 min. Scan: 1659 Chan: 1 Ion: 16172 us RIC: 18773 BC
Pair Count: 64 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

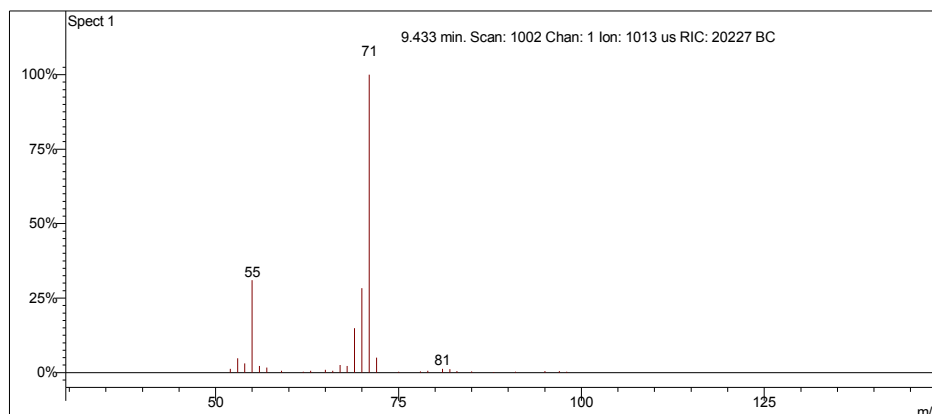
Scan 1604 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 1604, Time: 12.841 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 12.841 min. Scan: 1604 Chan: 1 Ion: 621 us RIC: 39419
Pair Count: 28 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1002 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 1002, Time: 9.433 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 9.433 min. Scan: 1002 Chan: 1 Ion: 1013 us RIC: 20227 BC
 Pair Count: 29 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
70	$[M]^{+} = C_5H_{10}^{+}$	Íon molecular. Alta intensidade. relativa revela molécula com ressonância ou cíclica.
55	$[M - 15]^{+} = C_4H_7^{+}$	Perda de metila. Pico base.
42	$[M - 28]^{+} = C_3H_6^{+}$	Perda de eteno.
41	$[M - 29]^{+} = C_3H_5^{+}$	Fragmentação no carbono beta à dupla ligação. Perda de C_2H_5 .

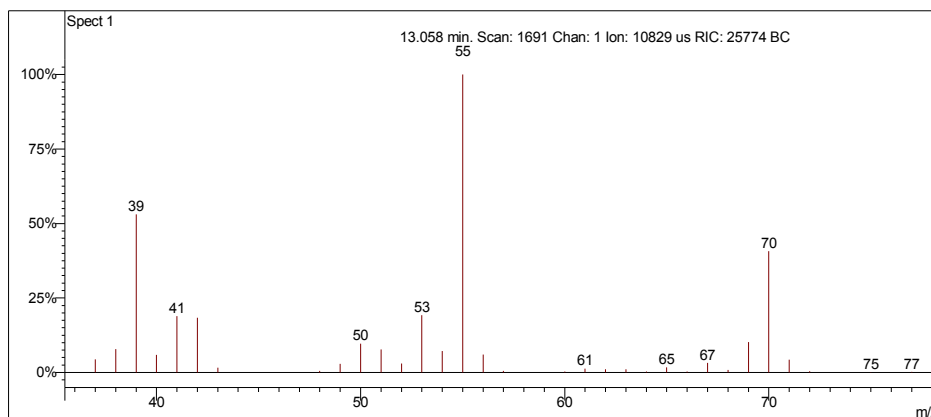
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 71$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_5H_{10} = C_5H_{11}^{+} + CH_3CN$		
$[M+1]^{+} = 71$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{+} + CH_3OH = CH_3OH_2^{+} + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^{+} + C_5H_{10} = C_5H_{11}^{+} + CH_3OH$		

2-metilbut-1-eno

Amostra de Gasolina Comum

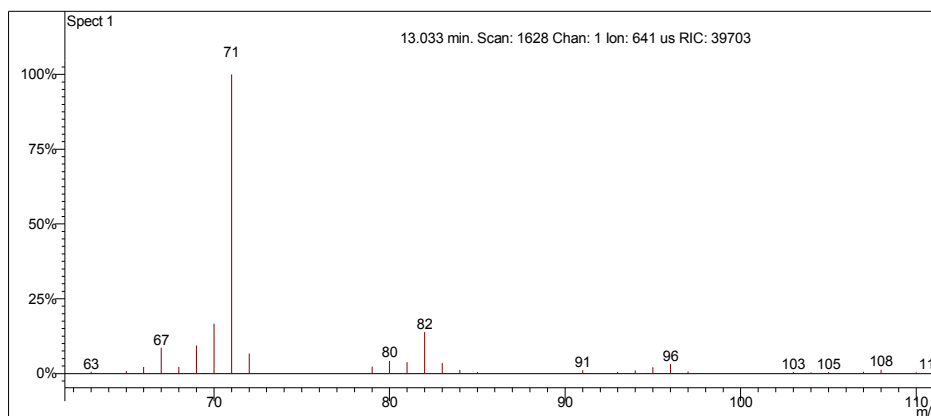
Scan 1691 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 1691, Time: 13.058 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 13.058 min. Scan: 1691 Chan: 1 Ion: 10829 us RIC: 25774 BC
Pair Count: 64 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

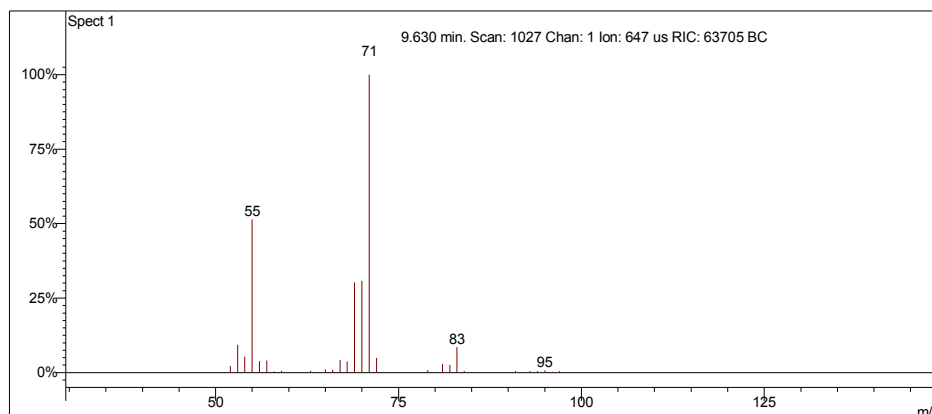
Scan 1628 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 1628, Time: 13.033 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 13.033 min. Scan: 1628 Chan: 1 Ion: 641 us RIC: 39703
Pair Count: 31 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1027 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 1027, Time: 9.630 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 9.630 min. Scan: 1027 Chan: 1 Ion: 647 us RIC: 63705 BC
 Pair Count: 32 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
70	$[M]^{++} = C_5H_{10}^+$	Alta intensidade relativa do íon molecular revela molécula com ressonância ou cíclica.
69	$[M-1]^+ = C_5H_9^+$	Perda de hidrogênio.
55	$[M-15]^+ = C_4H_7^+$	Perda de metila. Pico base.
42	$[M-28]^+ = C_3H_4^+$	Perda de eteno.
41	$[M-29]^+ = C_3H_5^+$	Fragmentação no carbono alfa. Perda de etila (C_2H_5).

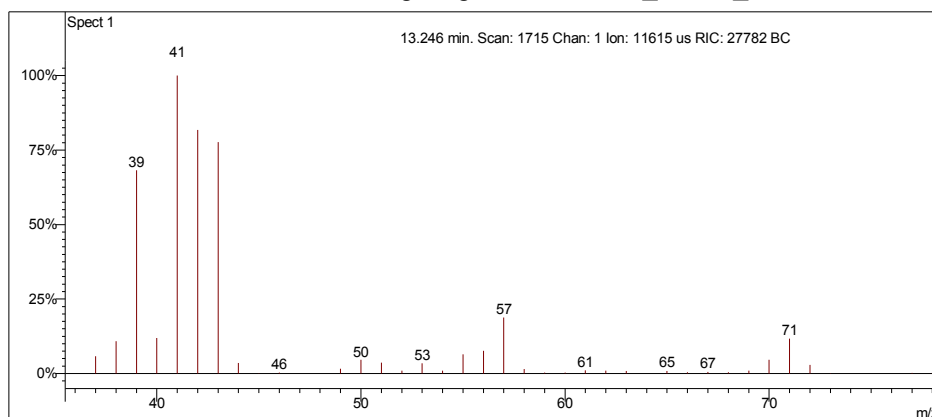
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 71$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_5H_{10} = C_5H_{11}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 71$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_5H_{10} = C_5H_{11}^+ + CH_3OH$		

Pentano

Amostra de Gasolina Comum

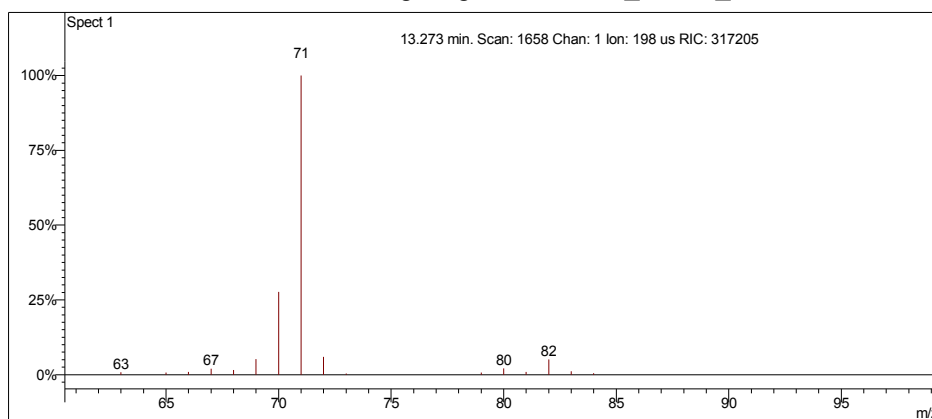
Scan 1715 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 1715, Time: 13.246 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 13.246 min. Scan: 1715 Chan: 1 Ion: 11615 us RIC: 27782 BC
Pair Count: 64 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

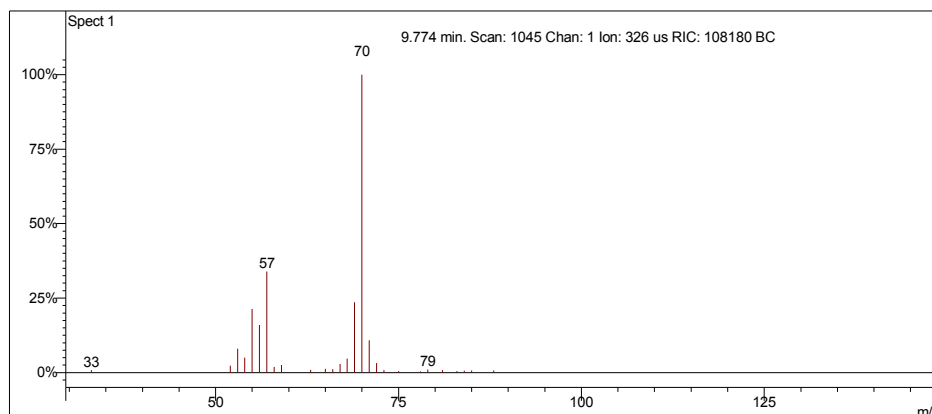
Scan 1658 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 1658, Time: 13.273 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 13.273 min. Scan: 1658 Chan: 1 Ion: 198 us RIC: 317205
Pair Count: 18 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1045 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 1045, Time: 9.774 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 9.774 min. Scan: 1045 Chan: 1 Ion: 326 us RIC: 108180 BC
Pair Count: 27 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
72	$[M]^{++} = C_5H_{12}^+$	Baixa intensidade do íon molecular indica molécula linear.
71	$[M-2]^+ = C_5H_9^+$	Perda de hidrogênio.
57	$[M-15]^+ = C_4H_9^+$	Perda de metila.
43	$[M-29]^+ = C_3H_7^+$	Perda de etila.
42	$C_3H_6^+$	Fragmentação alílica com rearranjos.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação alílica com rearranjos.

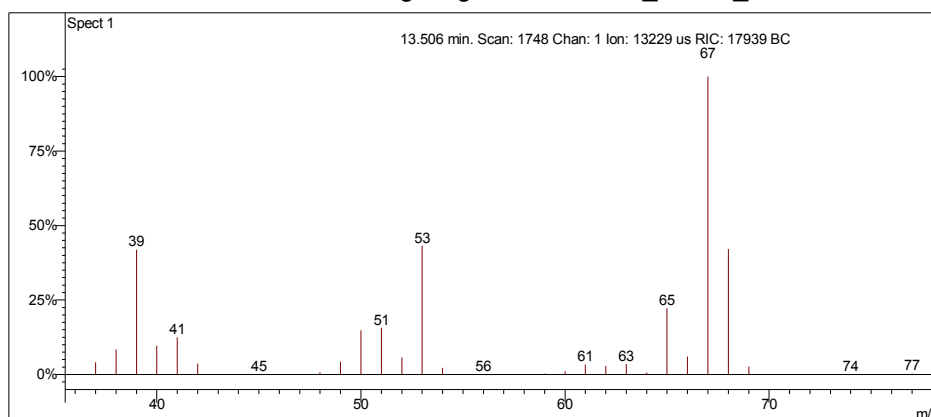
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^+ = 71$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_5H_{12} = C_5H_{11}^+ + CH_3CN$		
$[M-2]^+ = 70$ (instável)	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{++} = CH_2OH^+ + \cdot H$ $CH_2OH^+ + C_5H_{11}^+ = C_5H_{10}^+ + CH_3OH$		

2-metilbuta-1,3-dieno (Isopreno)

Amostra de Gasolina Comum

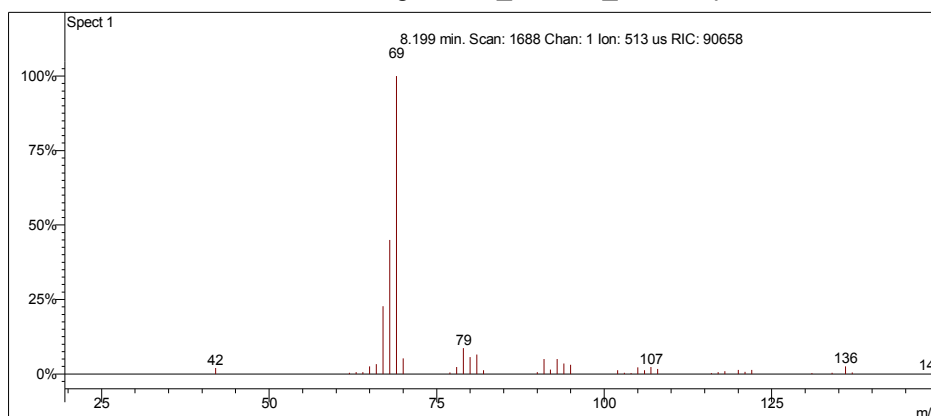
Scan 1748 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 1748, Time: 13.506 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 13.506 min. Scan: 1748 Chan: 1 Ion: 13229 us RIC: 17939 BC
Pair Count: 59 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

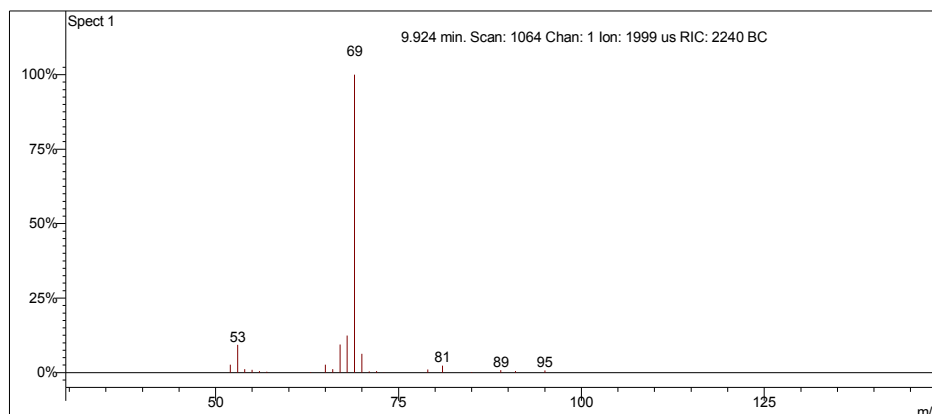
Scan 1688 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms
Scan No: 1688, Time: 8.199 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 8.199 min. Scan: 1688 Chan: 1 Ion: 513 us RIC: 90658
Pair Count: 40 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 150

Ionização Química com Metanol

Scan 1064 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 1064, Time: 9.924 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 9.924 min. Scan: 1064 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 2240 BC
 Pair Count: 22 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
68	$[M]^{++} = C_5H_8^+$	Alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
67	$[M-1]^+ = C_5H_7^+$	Perda de hidrogênio. Pico base
53	$[M-15]^+ = C_4H_5^+$	Perda de metila.
39	$[M-29]^+ = C_3H_3^+$	Perda de C_2H_5 com rearranjo de hidrogênio.

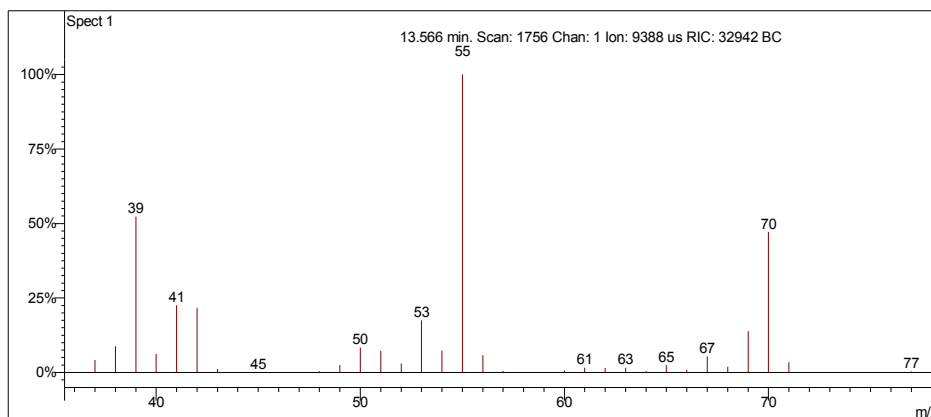
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 69$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_5H_8 = C_5H_9^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 69$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_5H_8 = C_5H_9^+ + CH_3OH$		

(E)-Pent-2-eno

Amostra de Gasolina Comum

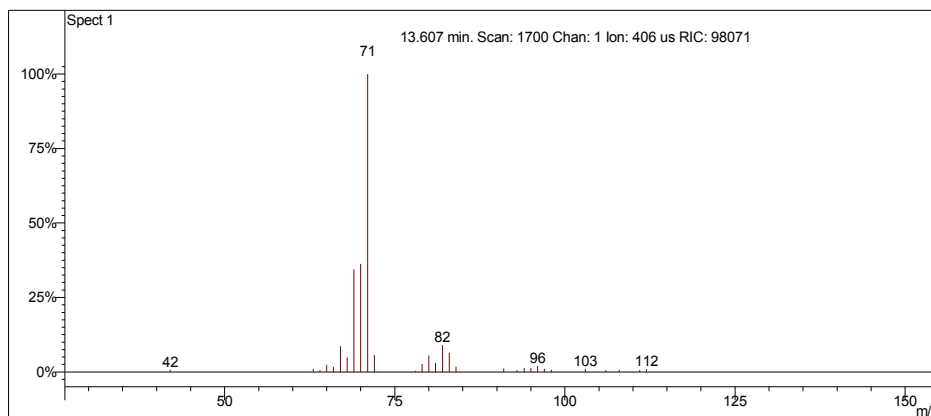
Scan 1756 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 1756, Time: 13.566 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 13.566 min. Scan: 1756 Chan: 1 Ion: 9388 us RIC: 32942 BC
Pair Count: 58 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

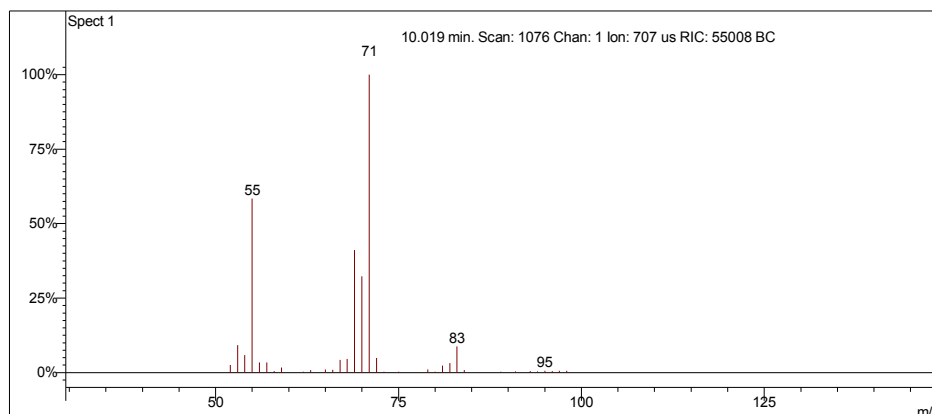
Scan 1700 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 1700, Time: 13.607 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 13.607 min. Scan: 1700 Chan: 1 Ion: 406 us RIC: 98071
Pair Count: 30 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1076 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 1076, Time: 10.019 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 10.019 min. Scan: 1076 Chan: 1 Ion: 707 us RIC: 55008 BC
 Pair Count: 34 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
70	$[M]^{++} = C_5H_{10}^+$	Íon molecular com alta intensidade indicando molécula com ressonância ou cíclica.
69	$[M-1]^+ = C_5H_9^+$	Perda de hidrogênio.
55	$[M-15]^+ = C_4H_7^+$	Perda de metila. Pico base.
41	$[M-29]^+ = C_3H_5^+$	Perda de C_2H_5 .

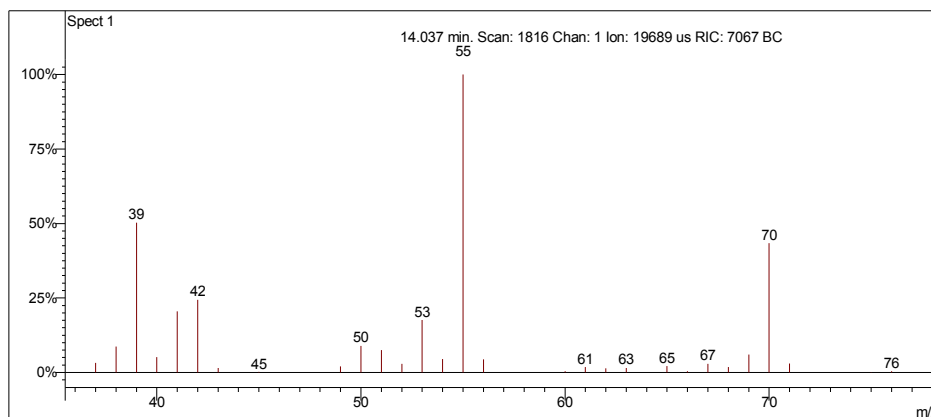
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 71$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_5H_{10} = C_5H_{11}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 71$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_5H_{10} = C_5H_{11}^+ + CH_3OH$		

(Z)-Pent-2-eno

Amostra de Gasolina Comum

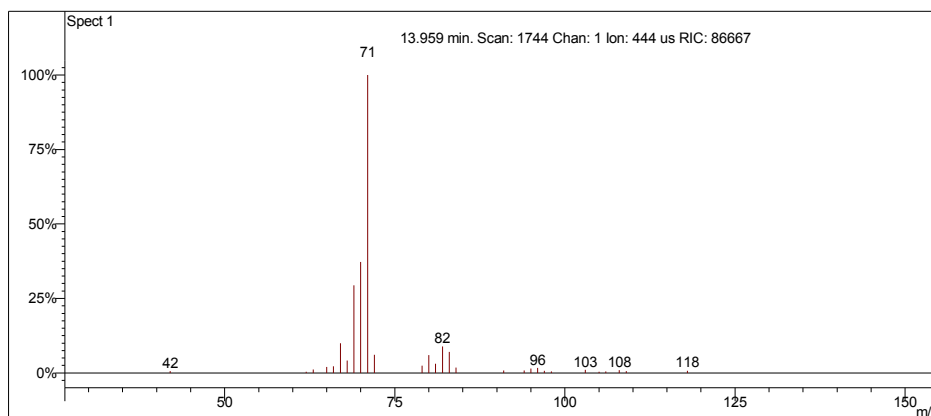
Scan 1816 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 1816, Time: 14.037 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 14.037 min. Scan: 1816 Chan: 1 Ion: 19689 us RIC: 7067 BC
Pair Count: 66 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

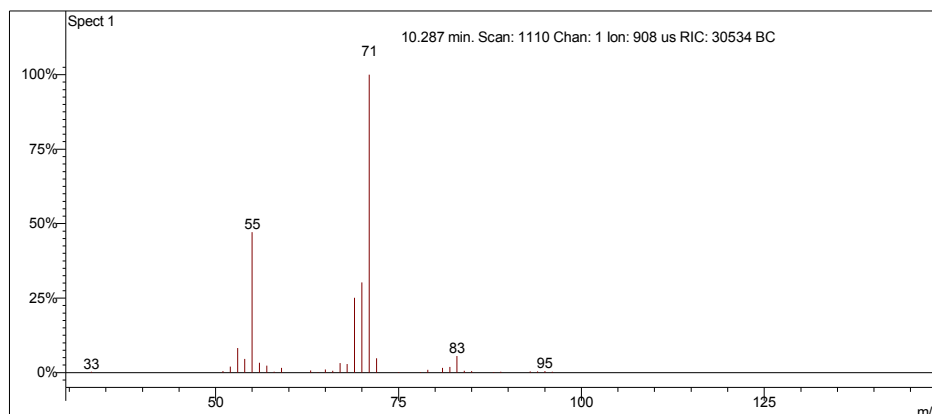
Scan 1744 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 1744, Time: 13.959 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 13.959 min. Scan: 1744 Chan: 1 Ion: 444 us RIC: 86667
Pair Count: 29 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1110 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 1110, Time: 10.287 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 10.287 min. Scan: 1110 Chan: 1 Ion: 908 us RIC: 30534 BC
Pair Count: 34 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
70	$[M]^{++} = C_5H_{10}^+$	Íon molecular com alta intensidade indicando molécula com ressonância ou cíclica.
69	$[M-1]^+ = C_5H_9^+$	Perda de hidrogênio.
55	$[M-15]^+ = C_4H_7^+$	Perda de metila. Pico base.
41	$[M-29]^+ = C_3H_5^+$	Perda de C_2H_5 .

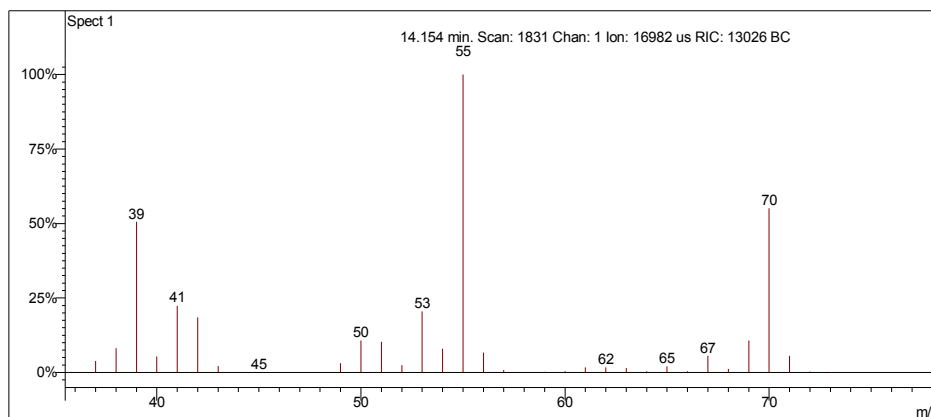
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 71$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_5H_{10} = C_5H_{11}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 71$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_5H_{10} = C_5H_{11}^+ + CH_3OH$		

2-metilbut-2-eno

Amostra de Gasolina Comum

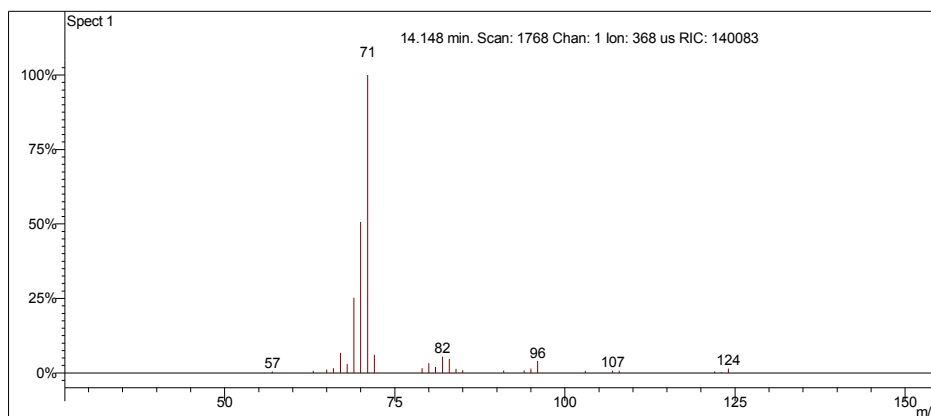
Scan 1831 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 1831, Time: 14.154 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 14.154 min. Scan: 1831 Chan: 1 Ion: 16982 us RIC: 13026 BC
Pair Count: 66 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

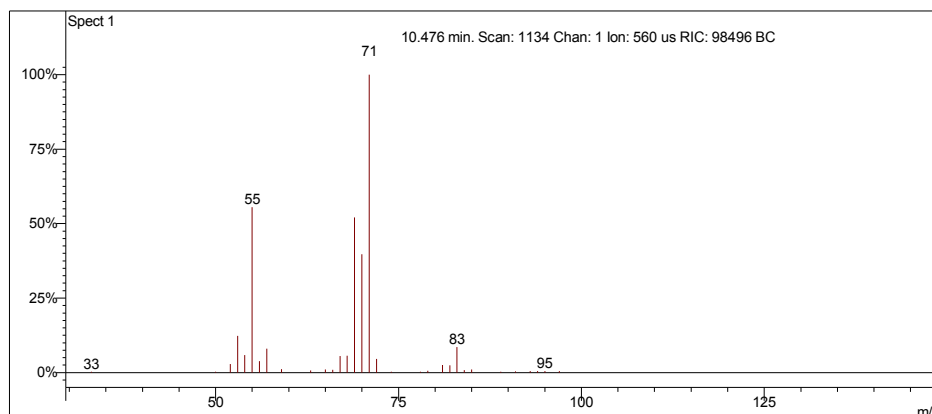
Scan 1768 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 1768, Time: 14.148 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 14.148 min. Scan: 1768 Chan: 1 Ion: 368 us RIC: 140083
Pair Count: 27 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1134 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 1134, Time: 10.476 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 10.476 min. Scan: 1134 Chan: 1 Ion: 560 us RIC: 98496 BC
Pair Count: 32 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
70	$[M]^{++} = C_5H_{10}^+$	Íon molecular com alta intensidade indicando molécula com ressonância ou cíclica.
69	$[M-1]^+ = C_5H_9^+$	Perda de hidrogênio.
55	$[M-15]^+ = C_4H_7^+$	Perda de metila. Pico base.
41	$[M-29]^+ = C_3H_5^+$	Perda de C_2H_5 .

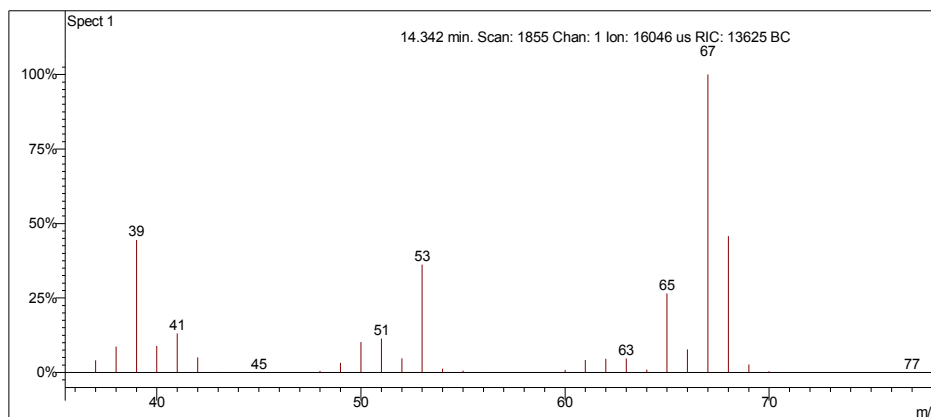
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 71$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_5H_{10} = C_5H_{11}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 71$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_5H_{10} = C_5H_{11}^+ + CH_3OH$		

(Z)-Penta-1,3-dieno

Amostra de Gasolina Comum

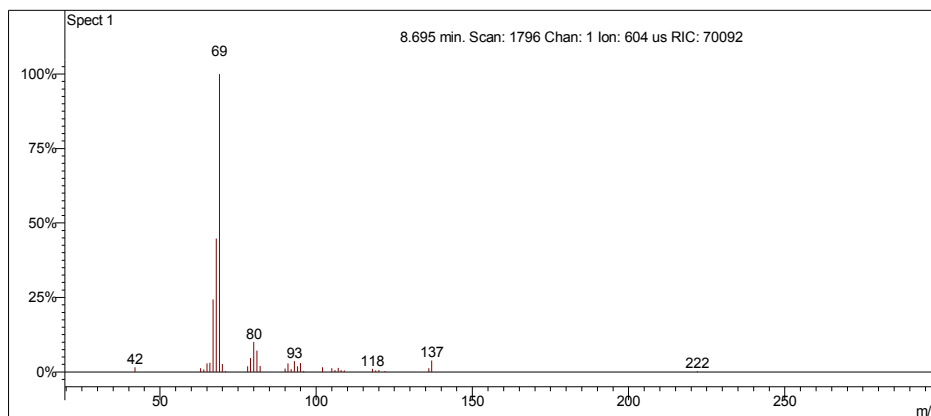
Scan 1855 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 1855, Time: 14.342 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 14.342 min. Scan: 1855 Chan: 1 Ion: 16046 us RIC: 13625 BC
Pair Count: 60 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

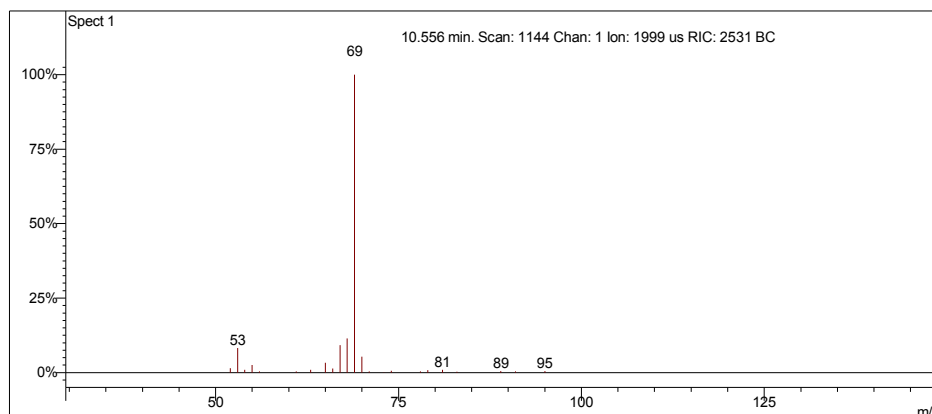
Scan 1796 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms
Scan No: 1796, Time: 8.695 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 8.695 min. Scan: 1796 Chan: 1 Ion: 604 us RIC: 70092
Pair Count: 35 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1144 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 1144, Time: 10.556 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 10.556 min. Scan: 1144 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 2531 BC
 Pair Count: 23 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
68	$[M]^{++} = C_5H_8^+$	Íon molecular com alta intensidade indicando molécula com ressonância ou cíclica.
67	$[M-1]^+ = C_5H_7^+$	Perda de hidrogênio.
65	$C_5H_7^+$	Rearranjos de hidrogênio.
53	$[M-15]^+ = C_4H_5^+$	Perda de metila.
39	$[M-29]^+ = C_3H_3^+$	Perda de C_2H_5 com rearranjos de hidrogênio.

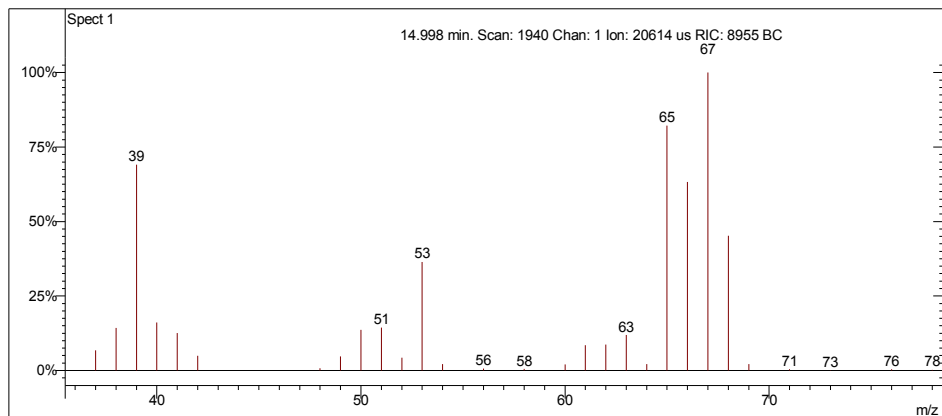
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 69$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_5H_8 = C_5H_9^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 69$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_5H_8 = C_5H_9^+ + CH_3OH$		

(Z)-Penta-1,2-dieno

Amostra de Gasolina Comum

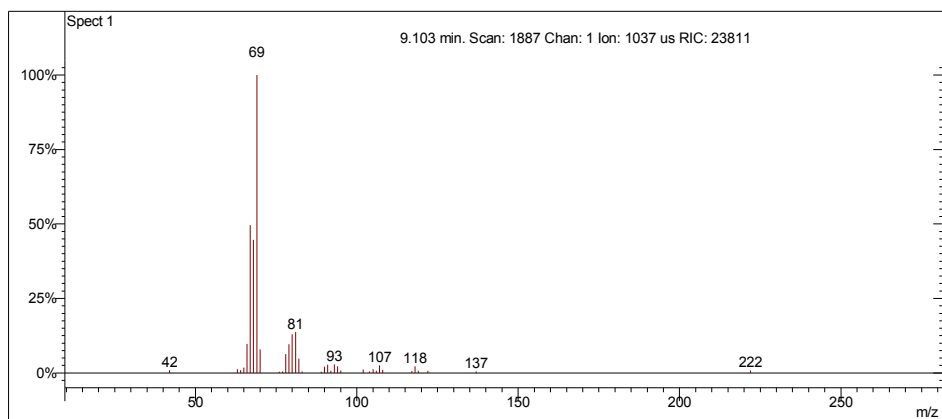
Scan 1940 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 1940, Time: 14.998 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 14.998 min. Scan: 1940 Chan: 1 Ion: 20614 us RIC: 8955 BC
Pair Count: 75 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

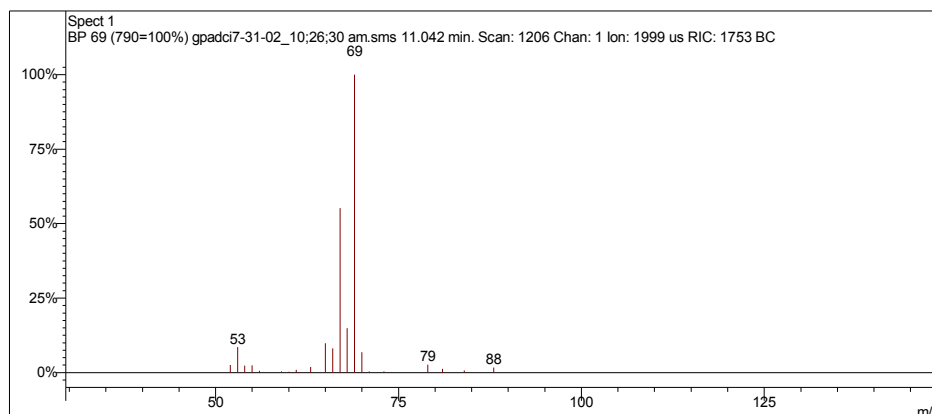
Scan 1887 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms
Scan No: 1887, Time: 9.103 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 9.103 min. Scan: 1887 Chan: 1 Ion: 1037 us RIC: 23811
Pair Count: 36 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1206 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 1206, Time: 11.042 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 11.042 min. Scan: 1206 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1753 BC
Pair Count: 21 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
68	$[M]^{++} = C_5H_8^+$	Íon molecular com alta intensidade indicando molécula com ressonância ou cíclica.
67	$[M-1]^+ = C_5H_7^+$	Perda de hidrogênio.
65	$C_5H_7^+$	Rearranjos de hidrogênio.
53	$[M-15]^+ = C_4H_5^+$	Perda de metila.
39	$[M-29]^+ = C_3H_3^+$	Perda de C_2H_5 com rearranjo de hidrogênio.

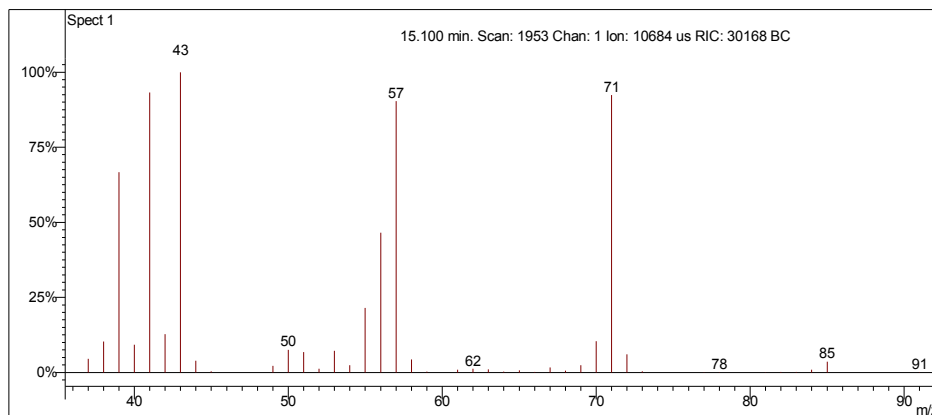
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 69$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_5H_8 = C_5H_9^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 69$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_5H_8 = C_5H_9^+ + CH_3OH$		

2,2-dimetilbutano

Amostra de Gasolina Comum

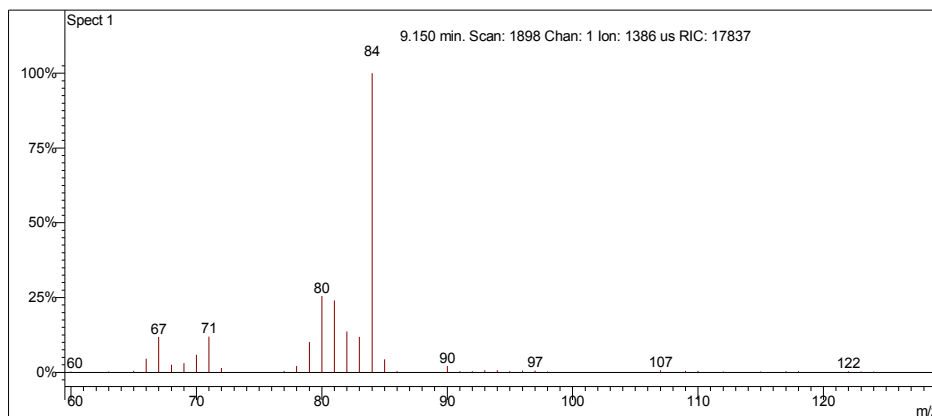
Scan 1953 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 1953, Time: 15.100 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 15.100 min. Scan: 1953 Chan: 1 Ion: 10684 us RIC: 30168 BC
Pair Count: 59 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

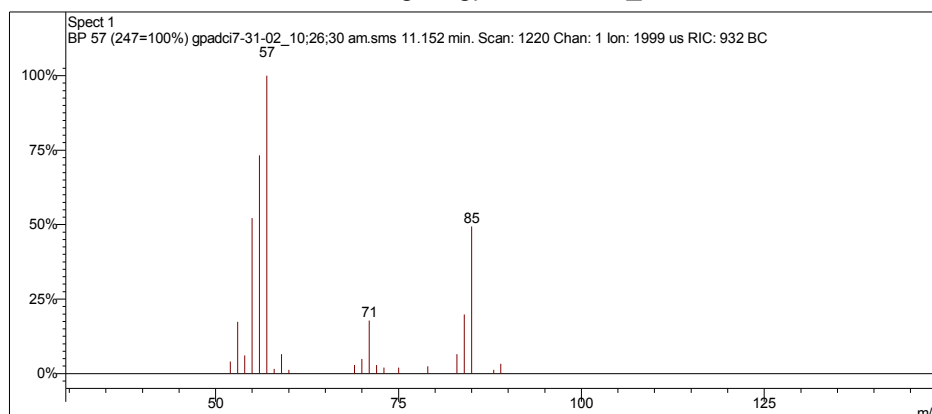
Scan 1898 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms
Scan No: 1898, Time: 9.150 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 9.150 min. Scan: 1898 Chan: 1 Ion: 1386 us RIC: 17837
Pair Count: 44 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol (fraca)

Scan 1220 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 1220, Time: 11.152 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 11.152 min. Scan: 1220 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 932 BC
Pair Count: 21 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
86 (ausente)	$[M]^+ = C_6H_{14}^+$	Ausência do íon molecular indica molécula linear.
85	$[M - 1]^+ = C_6H_{13}^+$	Perda de hidrogênio.
71	$[M - 15]^+ = C_5H_{11}^+$	Perda de metila.
57	$[M - 29]^+ = C_4H_9^+$	Fragmentação alílica com perda de C_2H_5 .
43	$C_3H_7^+$	Fragmentação alílica.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação alílica com rearranjos de hidrogênio.

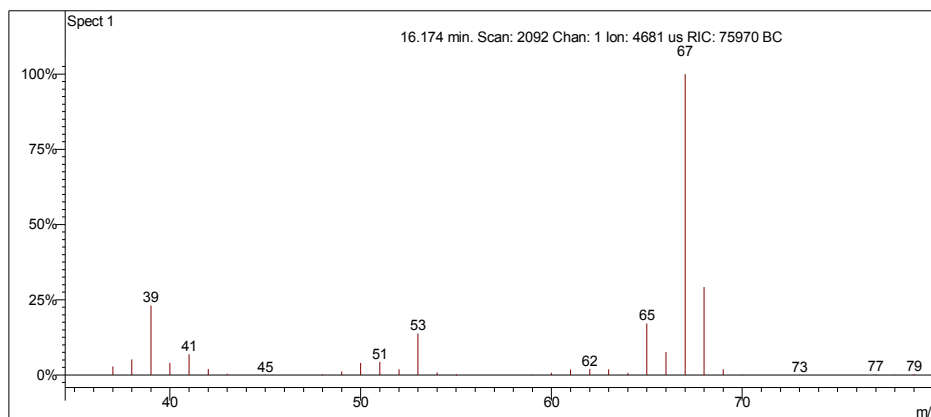
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M - 2]^+ = 84$ (instável)	Abstração de hidretos.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_6H_{13}^+ = C_6H_{12}^+ + CH_3CN$		
$[M - 1]^+ = 85$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{++} = CH_2OH^+ + \cdot H$ $CH_2OH^+ + C_6H_{14} = C_6H_{13}^+ + CH_3OH$		

Ciclopenteno

Amostra de Gasolina Comum

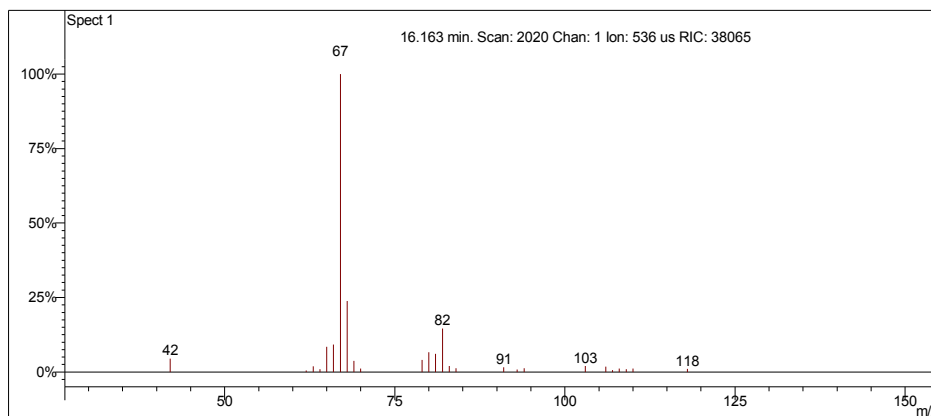
Scan 2092 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 2092, Time: 16.174 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 16.174 min. Scan: 2092 Chan: 1 Ion: 4681 us RIC: 75970 BC
Pair Count: 38 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

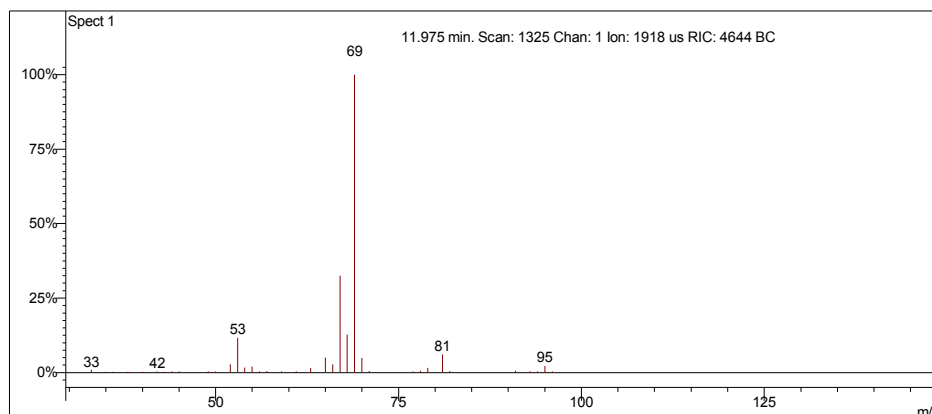
Scan 2020 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 2020, Time: 16.163 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 16.163 min. Scan: 2020 Chan: 1 Ion: 536 us RIC: 38065
Pair Count: 26 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1325 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 1325, Time: 11.975 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 11.975 min. Scan: 1325 Chan: 1 Ion: 1918 us RIC: 4644 BC
Pair Count: 39 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
68	$[M]^{++} = C_5H_8^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
67	$[M-1]^+ = C_5H_7^+$	Perda de hidrogênio. Pico base.
53	$[M-15]^+ = C_4H_3^+$	Perda de metila com rearranjos de hidrogênio.
50	$[M-28]^+ = C_3H_4^+$	Perda de eteno. Forma carbocátion estabilizado por ressonância.

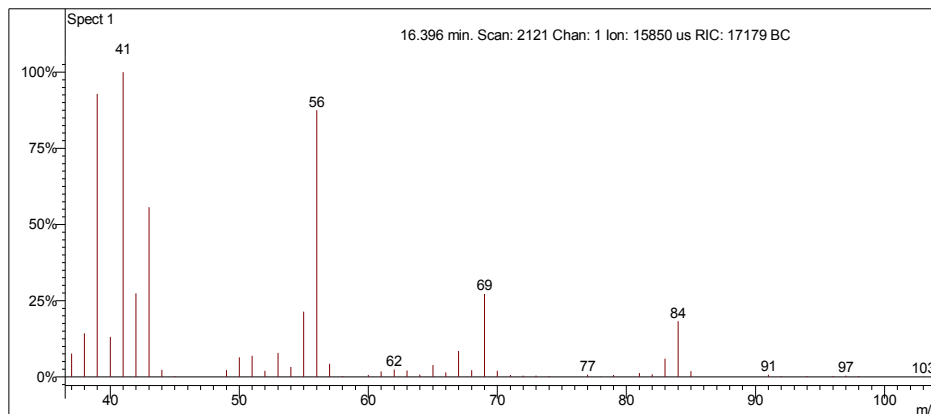
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
sem sinal		Acetonitrila
Íons 82 e 67 são provenientes de background, prováveis contaminantes.		
$[M+1]^+ = 69$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_5H_8 = C_5H_9^+ + CH_3OH$		

4-metilpent-1-eno

Amostra de Gasolina Comum

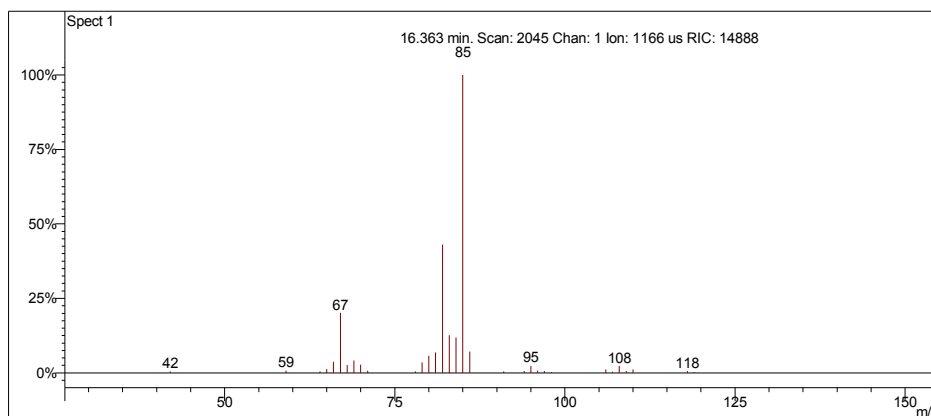
Scan 2121 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 2121, Time: 16.396 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 16.396 min. Scan: 2121 Chan: 1 Ion: 15850 us RIC: 17179 BC
Pair Count: 73 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

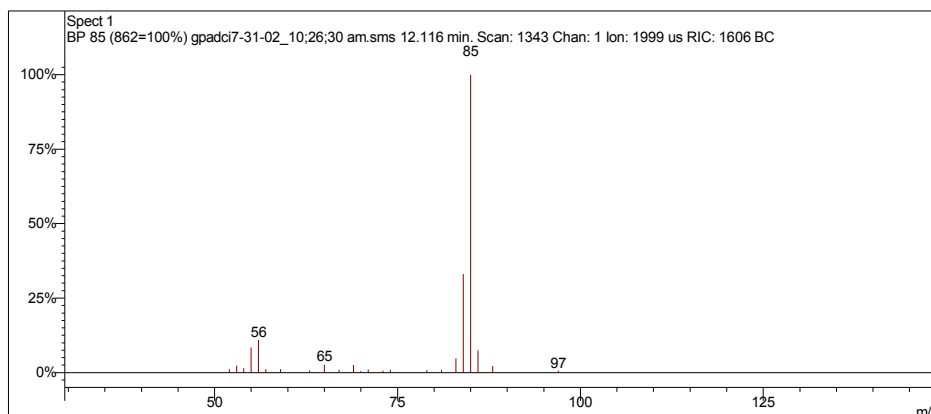
Scan 2045 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 2045, Time: 16.363 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 16.363 min. Scan: 2045 Chan: 1 Ion: 1166 us RIC: 14888
Pair Count: 32 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1343 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 1343, Time: 12.116 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 12.116 min. Scan: 1343 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1606 BC
Pair Count: 23 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
84	$[M]^{++} = C_6H_{12}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica
83	$[M-1]^+ = C_6H_{11}^+$	Perda de hidrogênio.
69	$[M-15]^+ = C_5H_9^+$	Perda de metila.
56	$[M-28]^+ = C_4H_8^+$	Perda de C_2H_4 . Rearranjo de hidrogênio.
55	$[M-29]^+ = C_4H_7^+$	Perda de C_2H_5 com rearranjos.
43	$C_3H_7^+$	Fragmentação no carbono beta à dupla ligação.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação no carbono beta à dupla ligação com rearranjos.

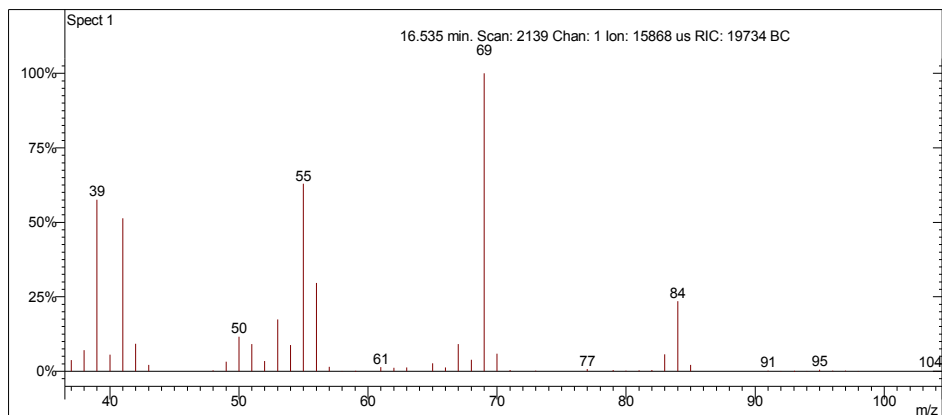
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 85$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_6\text{H}_{12} = \text{C}_6\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 85$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_6\text{H}_{12} = \text{C}_6\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

3-metilpent-1-eno

Amostra de Gasolina Comum

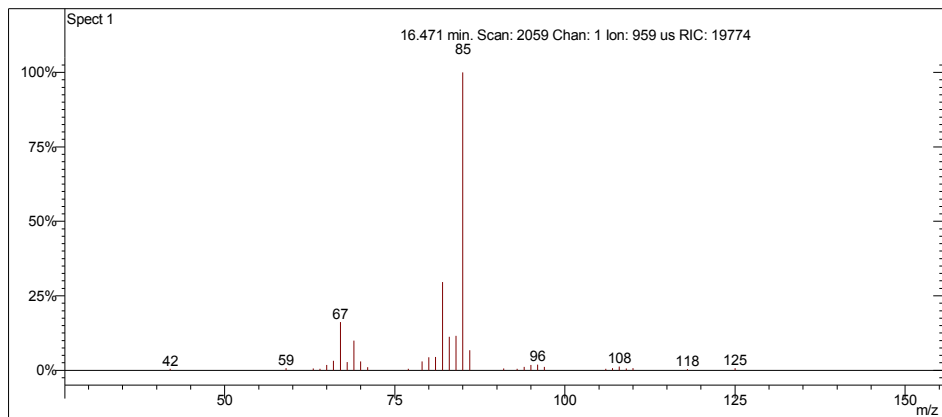
Scan 2139 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 2139, Time: 16.535 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 16.535 min. Scan: 2139 Chan: 1 Ion: 15868 us RIC: 19734 BC
Pair Count: 74 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

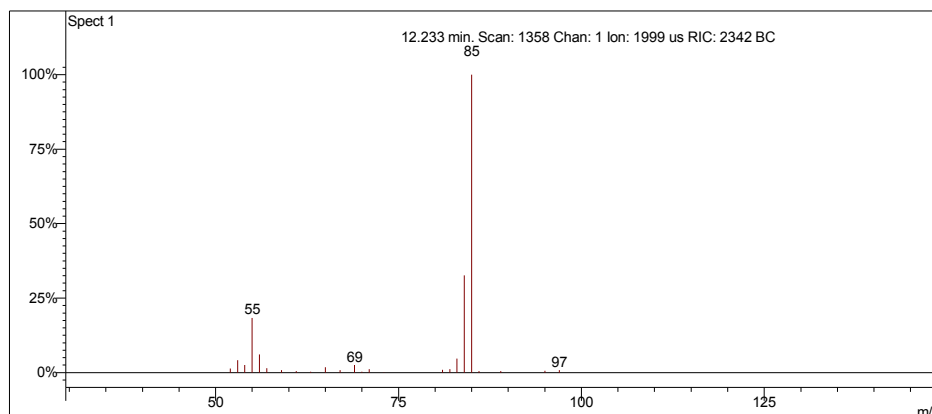
Scan 2059 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 2059, Time: 16.471 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 16.471 min. Scan: 2059 Chan: 1 Ion: 959 us RIC: 19774
Pair Count: 33 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1358 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 1358, Time: 12.233 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 12.233 min. Scan: 1358 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 2342 BC
 Pair Count: 24 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
84	$[M]^+ = C_6H_{12}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica
83	$[M-1]^+ = C_6H_{11}^+$	Perda de hidrogênio.
69	$[M-15]^+ = C_5H_9^+$	Perda de metila. Pico base.
56	$[M-28]^+ = C_4H_8^+$	Perda de C_2H_4 . Rearranjo de hidrogênio.
55	$[M-29]^+ = C_4H_7^+$	Perda de C_2H_5 .
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação alílica com rearranjos de hidrogênio.
39	$C_3H_3^+$	Fragmentação alílica com rearranjos de hidrogênio para formação do carbocátion.

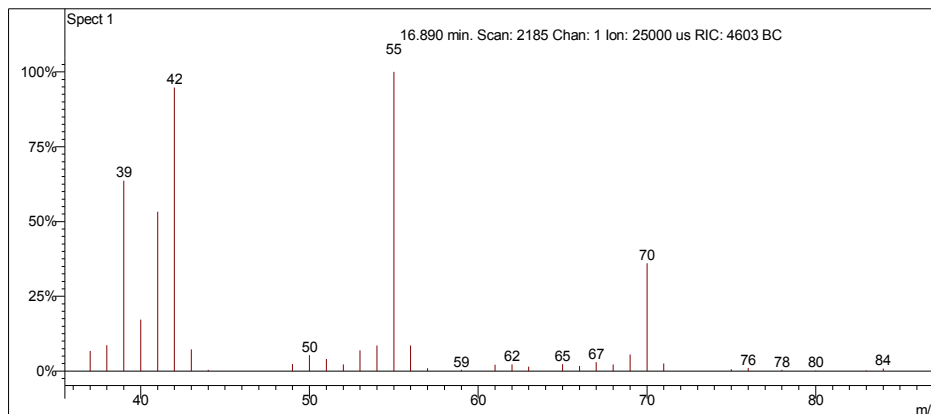
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 85$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\bullet} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \bullet\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_6\text{H}_{12} = \text{C}_6\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 85$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\bullet} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \bullet\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_6\text{H}_{12} = \text{C}_6\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Ciclopentano

Amostra de Gasolina Comum

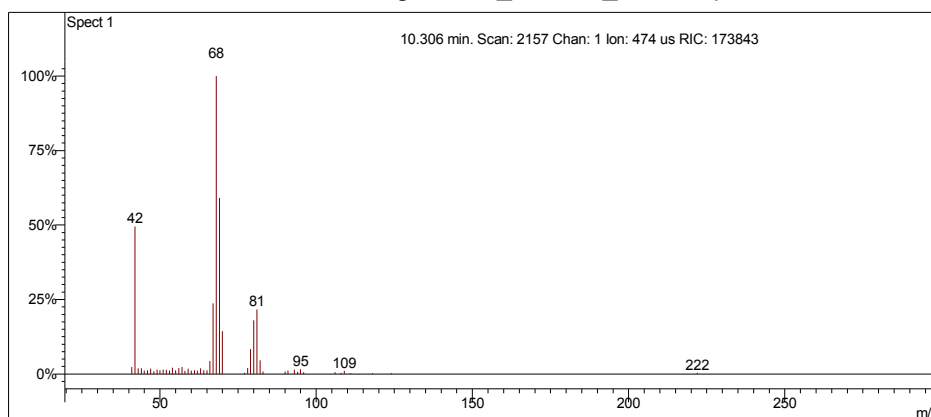
Scan 2185 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 2185, Time: 16.890 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 16.890 min. Scan: 2185 Chan: 1 Ion: 25000 us RIC: 4603 BC
Pair Count: 69 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

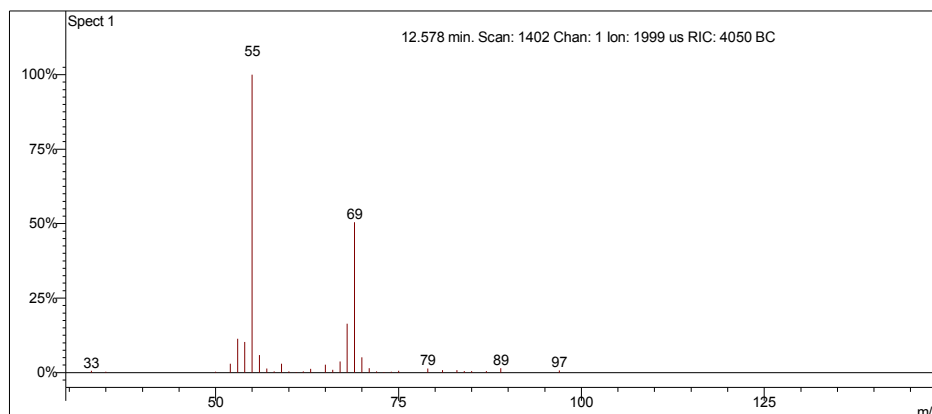
Scan 2157 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms
Scan No: 2157, Time: 10.306 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 10.306 min. Scan: 2157 Chan: 1 Ion: 474 us RIC: 173843
Pair Count: 50 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1402 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 1402, Time: 12.578 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 12.578 min. Scan: 1402 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 4050 BC
Pair Count: 34 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
70	$[M]^{++} = C_5H_{10}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
69	$[M-1]^+ = C_5H_9^+$	Perda de hidrogênio.
55	$[M-15]^+ = C_4H_7^+$	Fragmentação do anel com perda de metila, com rearranjos de hidrogênio.
42	$[M-28]^+ = C_3H_6^+$	Fragmentação do anel com perda de C_2H_4 .
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação do anel.

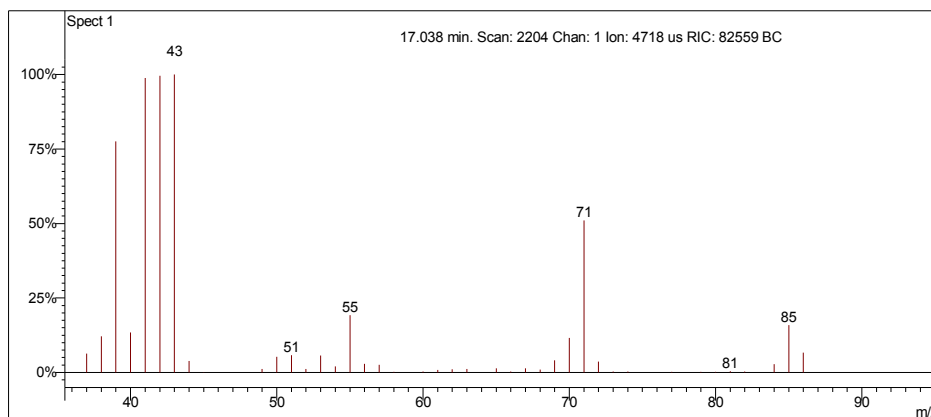
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-2]^+ = 68$ (instável)	Abstração de hidretos.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_5H_9^+ = C_5H_8^+ + CH_3CN$		
$[M-1]^+ = 69$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{++} = CH_2OH^+ + \cdot H$ $CH_2OH^+ + C_5H_{10} = C_5H_9^+ + CH_3OH$		

2,3-dimetilbutano

Amostra de Gasolina Comum

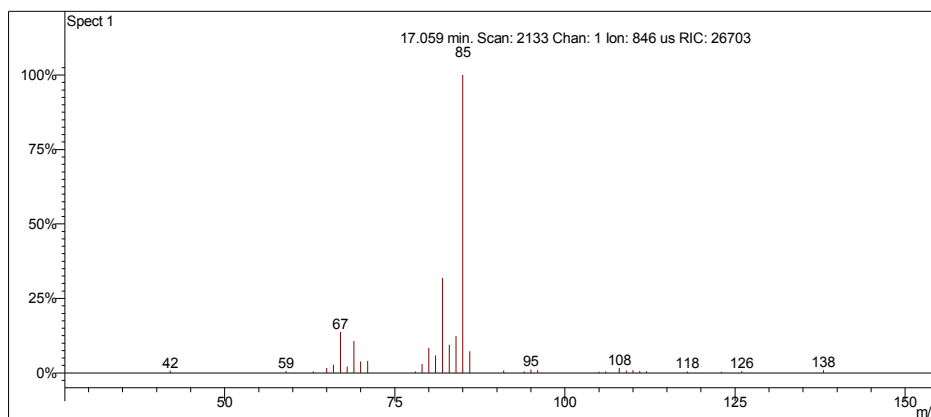
Scan 2204 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 2204, Time: 17.038 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 17.038 min. Scan: 2204 Chan: 1 Ion: 4718 us RIC: 82559 BC
Pair Count: 46 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

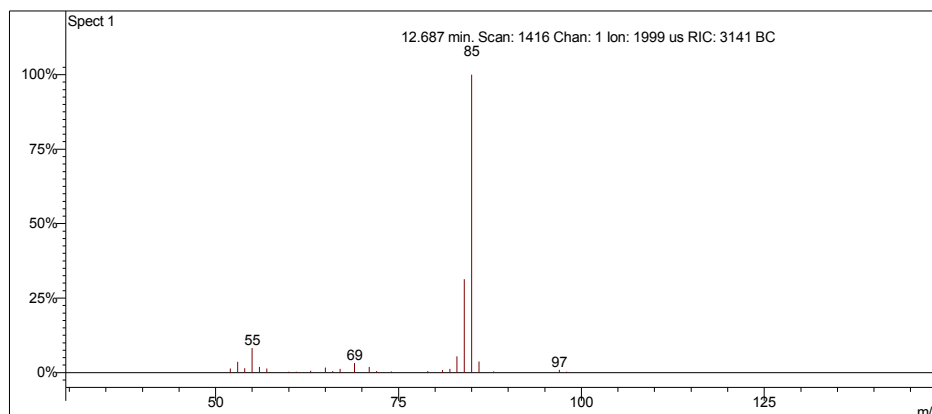
Scan 2133 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 2133, Time: 17.059 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 17.059 min. Scan: 2133 Chan: 1 Ion: 846 us RIC: 26703
Pair Count: 34 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1416 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 1416, Time: 12.687 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 12.687 min. Scan: 1416 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 3141 BC
 Pair Count: 27 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
86	$[M]^+ = C_6H_{14}^+$	Baixa intensidade do íon molecular indica molécula linear.
85	$[M-1]^+ = C_6H_{13}^+$	Perda de hidrogênio.
71	$[M-15]^+ = C_5H_{11}^+$	Perda de metila.
55	$C_4H_7^+$	Perda de metila e metano.
43	$C_3H_7^+$	Fragmentação alílica entre os carbonos terciários.
42	$C_3H_6^+$	Fragmentação alílica entre os carbonos terciários com rearranjo.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação alílica entre os carbonos terciários com rearranjos de hidrogênio. Pico base.
39	$C_3H_3^+$	Rearranjos de hidrogênio para formação do carbocátion.

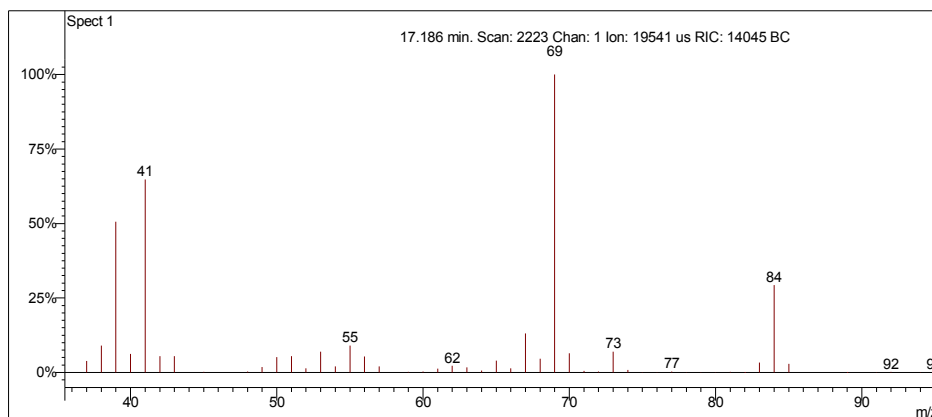
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M - 1]^+ = 85$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\bullet} = \text{CH}_2\text{CN}^+ + \cdot\text{H}$ $\text{CH}_2\text{CN}^+ + \text{C}_6\text{H}_{14} = \text{C}_6\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M - 1]^+ = 85$	Abstração de hidreto.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\bullet} = \text{CH}_2\text{OH}^+ + \cdot\text{H}$ $\text{CH}_2\text{OH}^+ + \text{C}_6\text{H}_{14} = \text{C}_6\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

4-metilpent-2-eno

Amostra de Gasolina Comum

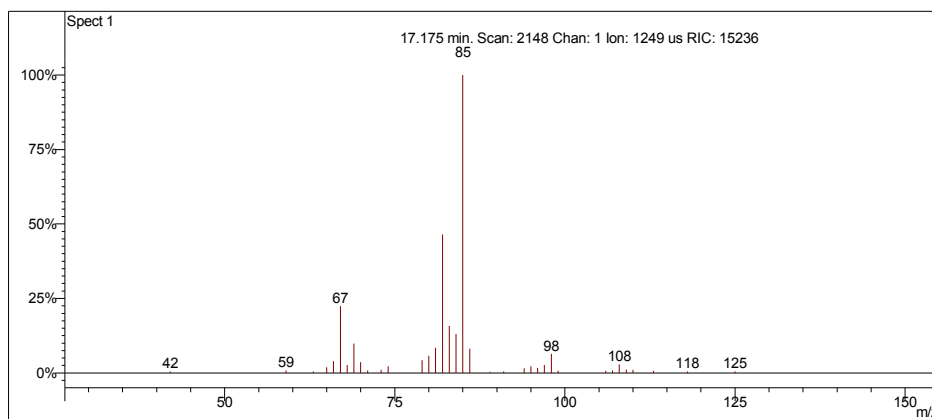
Scan 2223 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 2223, Time: 17.186 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 17.186 min. Scan: 2223 Chan: 1 Ion: 19541 us RIC: 14045 BC
Pair Count: 85 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

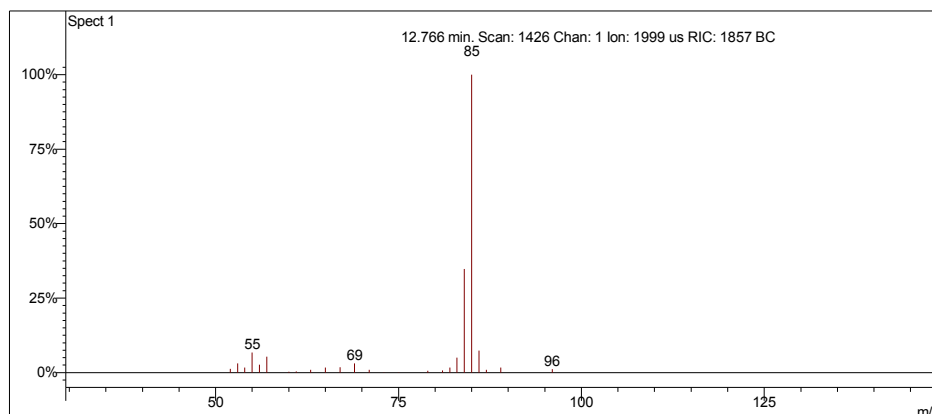
Scan 2148 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 2148, Time: 17.175 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 17.175 min. Scan: 2148 Chan: 1 Ion: 1249 us RIC: 15236
Pair Count: 36 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1426 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 1426, Time: 12.766 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 12.766 min. Scan: 1426 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1857 BC
 Pair Count: 25 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
84	$[M]^{++} = C_6H_{12}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
83	$[M-1]^+ = C_6H_{10}^+$	Perda de hidrogênio.
69	$[M-15]^+ = C_5H_{11}^+$	Perda de metila. Pico base.
55	$C_4H_7^+$	Fragmentação alílica com rearranjos de hidrogênio e perda de etila.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação alílica com rearranjos de hidrogênio.

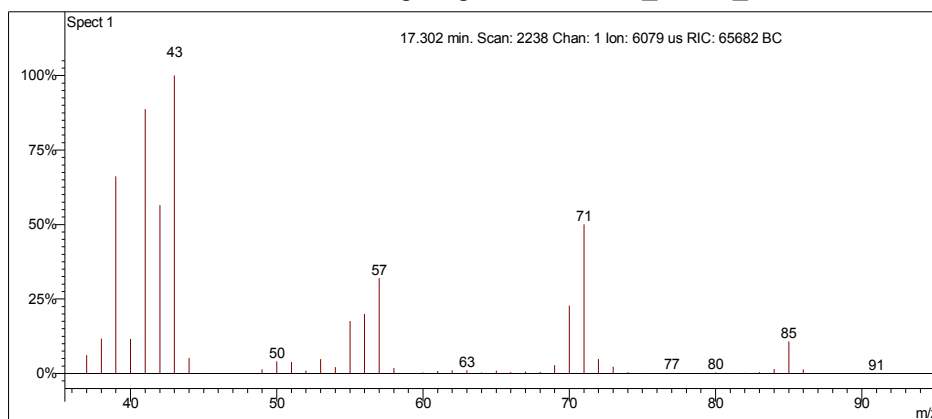
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 85$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_6H_{12} = C_6H_{13}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 85$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_6H_{12} = C_6H_{13}^+ + CH_3OH$		

2-metilpentano

Amostra de Gasolina Comum

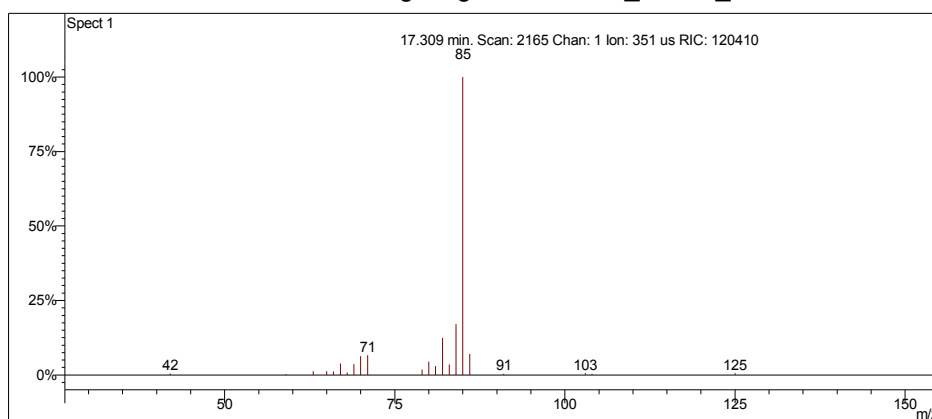
Scan 2238 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 2238, Time: 17.302 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 17.302 min. Scan: 2238 Chan: 1 Ion: 6079 us RIC: 65682 BC
Pair Count: 58 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

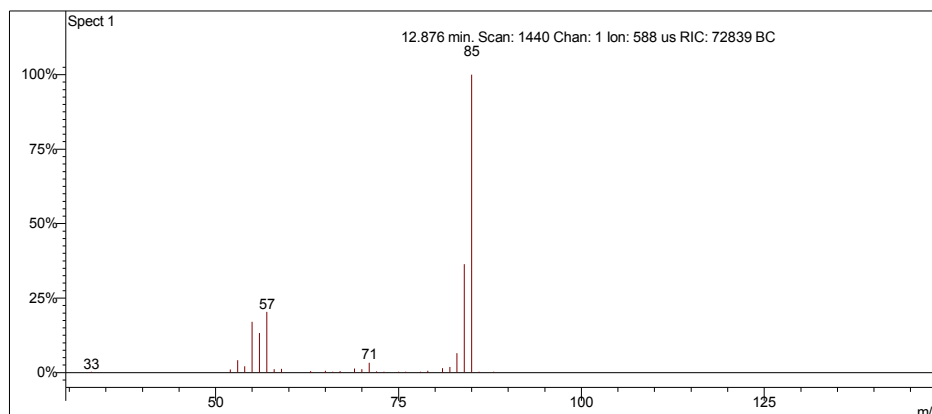
Scan 2165 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 2165, Time: 17.309 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 17.309 min. Scan: 2165 Chan: 1 Ion: 351 us RIC: 120410
Pair Count: 22 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1440 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 1440, Time: 12.876 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 12.876 min. Scan: 1440 Chan: 1 Ion: 588 us RIC: 72839 BC
 Pair Count: 29 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
86	$[M]^{++} = C_6H_{14}^+$	Baixa intensidade do íon molecular indica molécula linear.
85	$[M-1]^+ = C_6H_{11}^+$	Perda de hidrogênio.
71	$[M-15]^+ = C_5H_{11}^+$	Perda de metila.
57	$C_4H_9^+$	Perda de C_2H_5 . Fragmentação alílica.
43	$C_3H_7^+$	Perda de C_3H_7 . Fragmentação alílica. Pico base.
42	$C_3H_6^+$	Perda de C_3H_8 (propano).
41	$C_3H_5^+$	Rearranjos de hidrogênio.

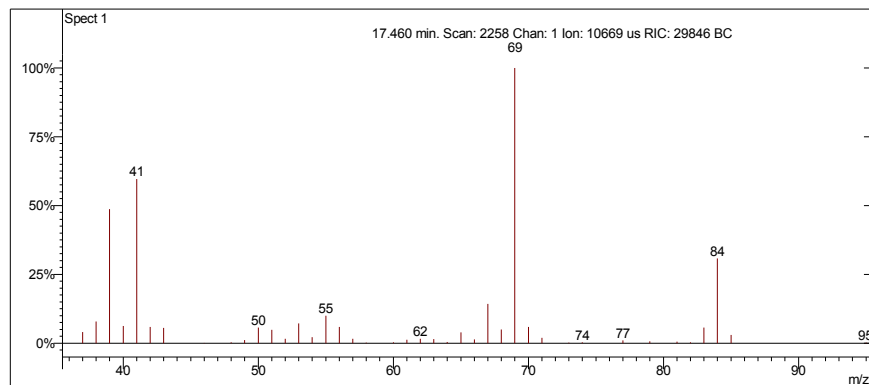
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M - 1]^+ = 85$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\bullet} = \text{CH}_2\text{CN}^+ + \cdot\text{H}$ $\text{CH}_2\text{CN}^+ + \text{C}_6\text{H}_{14} = \text{C}_6\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M - 1]^+ = 85$	Abstração de hidreto.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\bullet} = \text{CH}_2\text{OH}^+ + \cdot\text{H}$ $\text{CH}_2\text{OH}^+ + \text{C}_6\text{H}_{14} = \text{C}_6\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 1

Amostra de Gasolina Comum

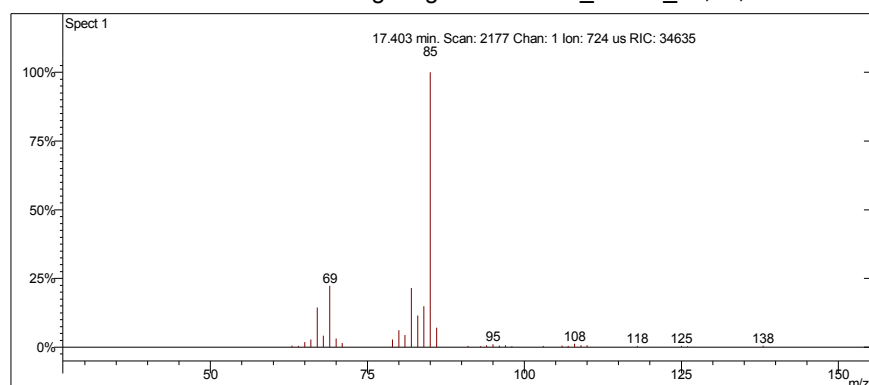
Scan 2258 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
 Scan No: 2258, Time: 17.460 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 17.460 min. Scan: 2258 Chan: 1 Ion: 10669 us RIC: 29846 BC
 Pair Count: 56 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

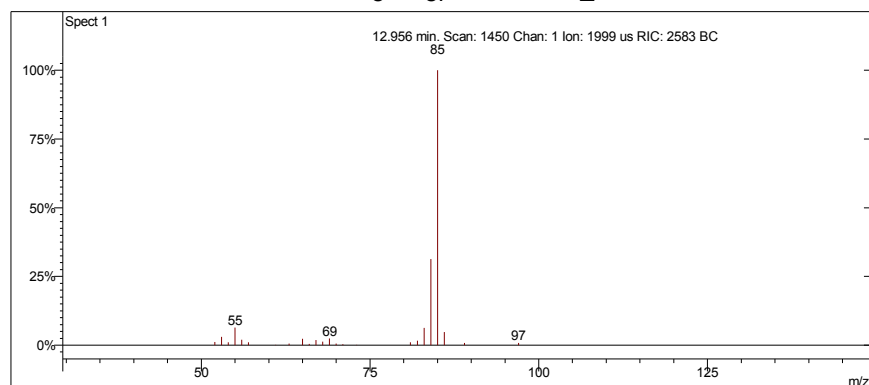
Scan 2177 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
 Scan No: 2177, Time: 17.403 minutes
 No averaging. Not background corrected.
 Comment: 17.403 min. Scan: 2177 Chan: 1 Ion: 724 us RIC: 34635
 Pair Count: 34 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1450 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 1450, Time: 12.956 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 12.956 min. Scan: 1450 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 2583 BC
 Pair Count: 24 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
84	$[M]^{+} = C_6H_{12}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica. Ver quadro ionização química.
83	$[M-1]^{+} = C_6H_{10}^{+}$	Perda de hidrogênio.
69	$[M-15]^{+} = C_5H_{11}^{+}$	Perda de metila. Pico base
55	$C_4H_7^{+}$	Perda de etila.
41	$C_3H_5^{+}$	Perda de propila.
39	$C_3H_3^{+}$	Rearranjos de hidrogênio para formação do carbocátion.
Conclusão: olefínico com 6 carbonos.		

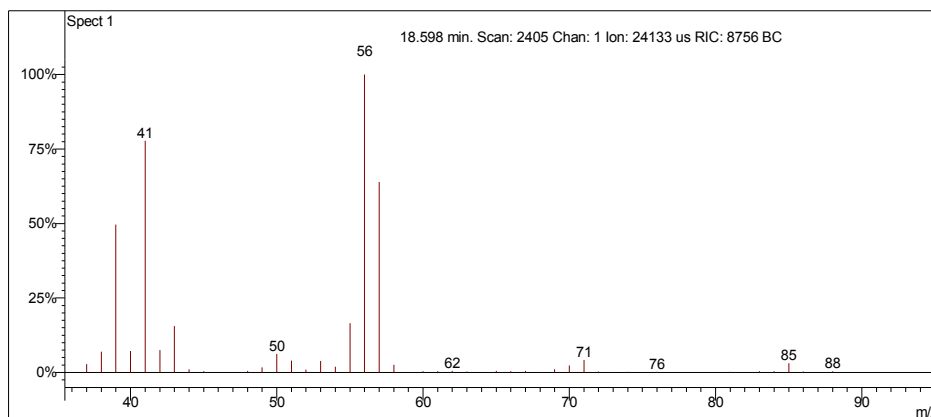
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 85$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_6H_{12} = C_6H_{13}^{+} + CH_3CN$		
$[M+1]^{+} = 85$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{+} + CH_3OH = CH_3OH_2^{+} + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^{+} + C_6H_{12} = C_6H_{13}^{+} + CH_3OH$		

3-metilpentano

Amostra de Gasolina Comum

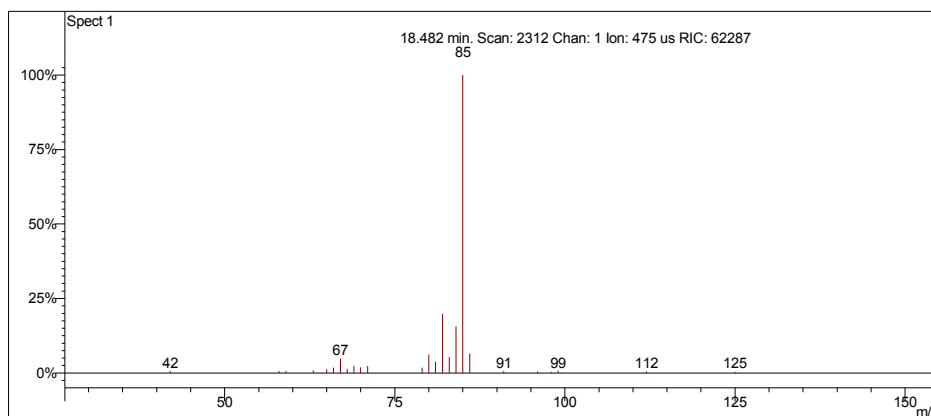
Scan 2405 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 2405, Time: 18.598 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 18.598 min. Scan: 2405 Chan: 1 Ion: 24133 us RIC: 8756 BC
Pair Count: 69 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

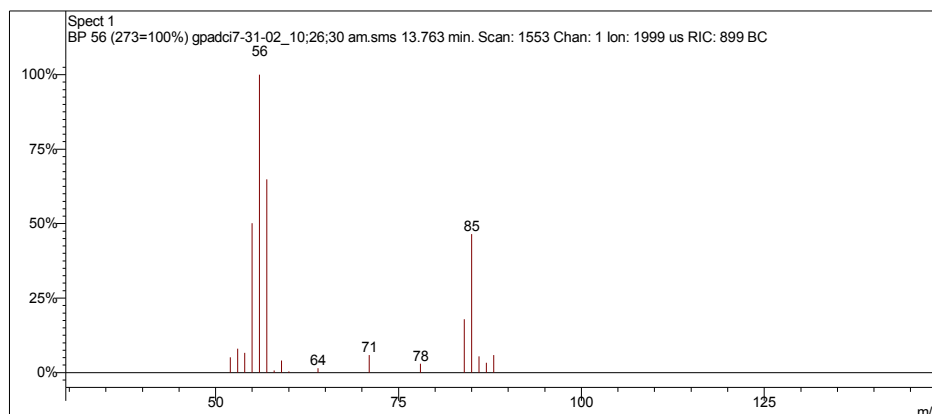
Scan 2312 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 2312, Time: 18.482 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 18.482 min. Scan: 2312 Chan: 1 Ion: 475 us RIC: 62287
Pair Count: 25 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1553 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 1553, Time: 13.763 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 13.763 min. Scan: 1553 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 899 BC
Pair Count: 17 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
86 (ausente)	$[M]^{++} = C_6H_{14}^+$	Baixa intensidade do íon molecular indica molécula linear.
85	$[M-1]^+ = C_6H_{13}^+$	Perda de hidrogênio.
71	$[M-15]^+ = C_5H_{10}^+$	Perda de metila.
57	$C_4H_9^+$	Perda de C_2H_5 . Fragmentação simples.
56	$C_4H_8^+$	Perda de etano (C_2H_6) com rearranjo.
41	$C_3H_5^+$	Rearranjos de hidrogênio.

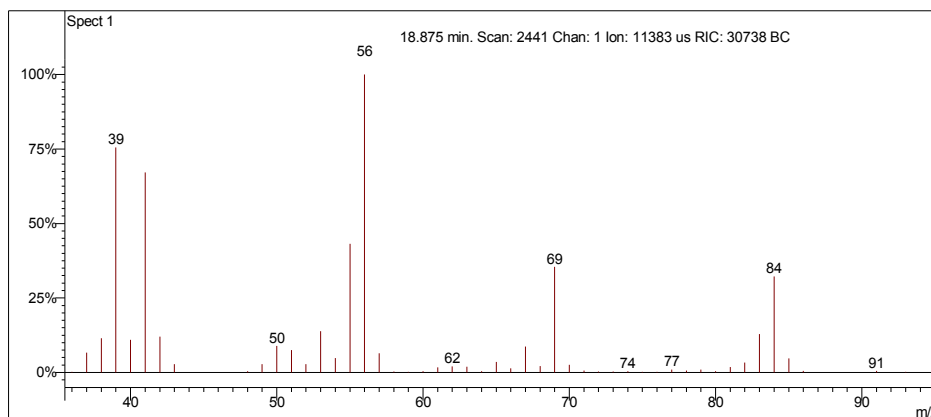
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^+ = 85$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_6H_{14} = C_6H_{13}^+ + CH_3CN$		
$[M-1]^+ = 85$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{++} = CH_2OH^+ + \cdot H$ $CH_2OH^+ + C_6H_{14} = C_6H_{13}^+ + CH_3OH$		

2-metilpent-1-eno

Amostra de Gasolina Comum

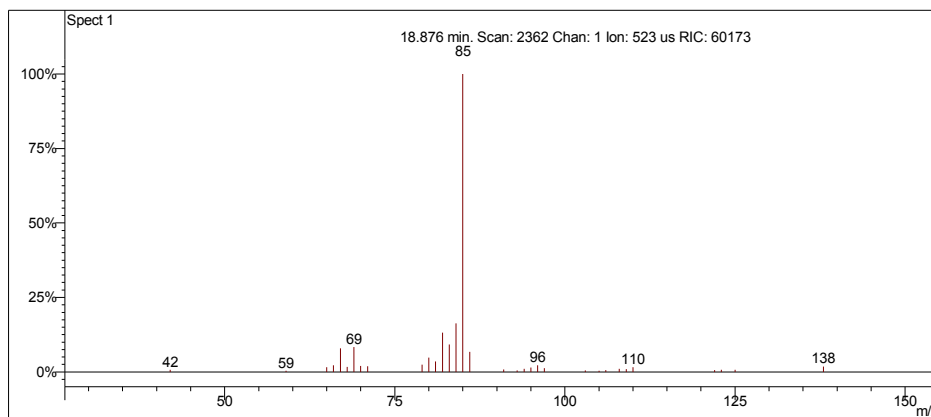
Scan 2441 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 2441, Time: 18.875 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 18.875 min. Scan: 2441 Chan: 1 Ion: 11383 us RIC: 30738 BC
Pair Count: 67 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

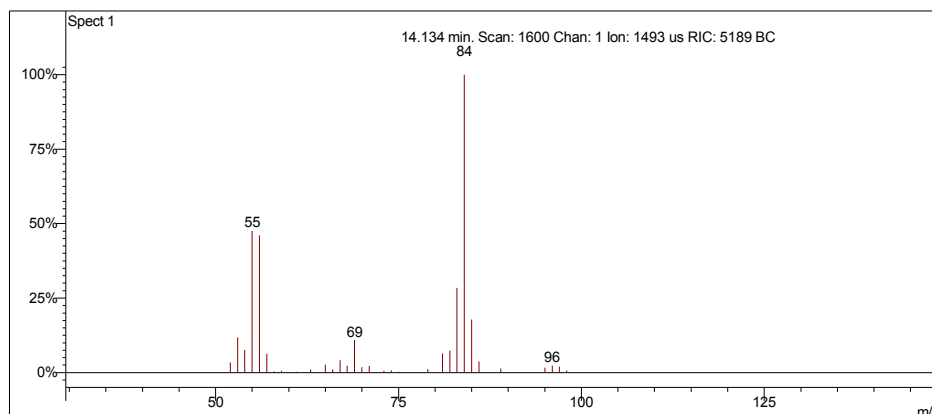
Scan 2362 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 2362, Time: 18.876 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 18.876 min. Scan: 2362 Chan: 1 Ion: 523 us RIC: 60173
Pair Count: 33 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1600 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 1600, Time: 14.134 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 14.134 min. Scan: 1600 Chan: 1 Ion: 1493 us RIC: 5189 BC
 Pair Count: 33 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
84	$[M]^{+} = C_6H_{12}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica
69	$[M-15]^{+} = C_5H_9^{+}$	Perda de metila.
56	$[M-28]^{+} = C_4H_8^{+}$	Fragmentação no carbono alfa à dupla ligação. Perda de C_2H_4 . Rearranjo de hidrogênio.
55	$[M-29]^{+} = C_4H_7^{+}$	Fragmentação no carbono beta à dupla ligação. Perda de C_2H_5 .
41	$C_3H_5^{+}$	Rearranjos de hidrogênio.

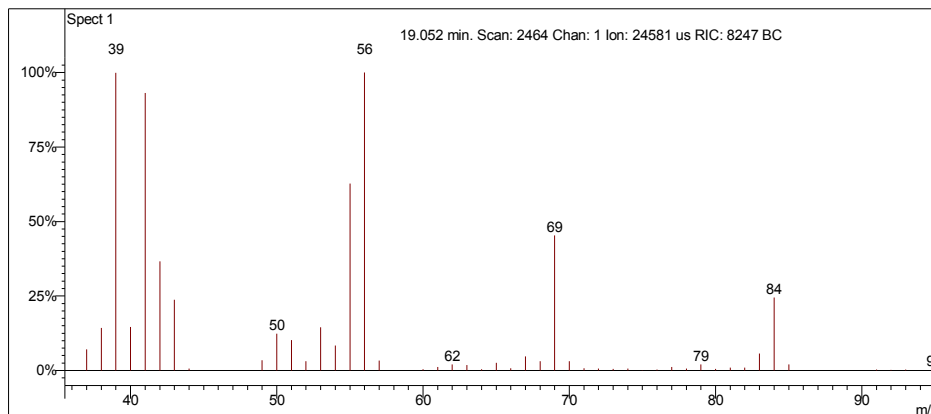
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 85$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_6H_{12} = C_6H_{13}^{+} + CH_3CN$		
$[M+1]^{+} = 84$	Transferência de carga.	Metanol
$CH_3OH^{+} + C_6H_{12} = C_6H_{12}^{+} + CH_3OH.$		

Hex-1-eno

Amostra de Gasolina Comum

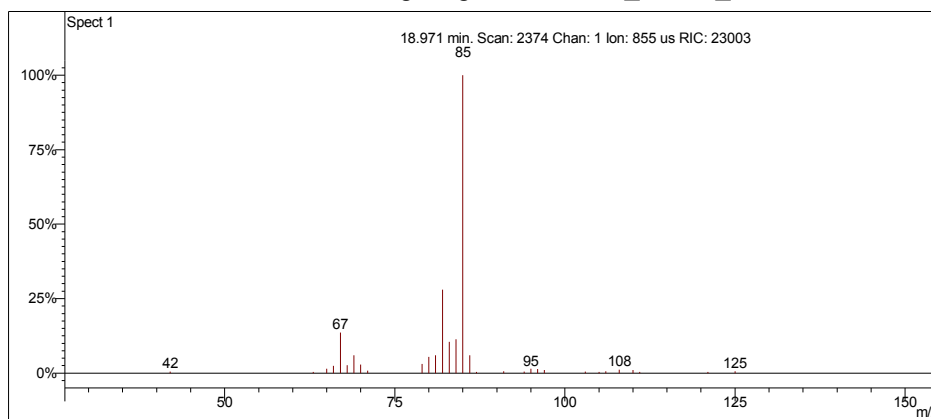
Scan 2464 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 2464, Time: 19.052 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 19.052 min. Scan: 2464 Chan: 1 Ion: 24581 us RIC: 8247 BC
Pair Count: 88 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

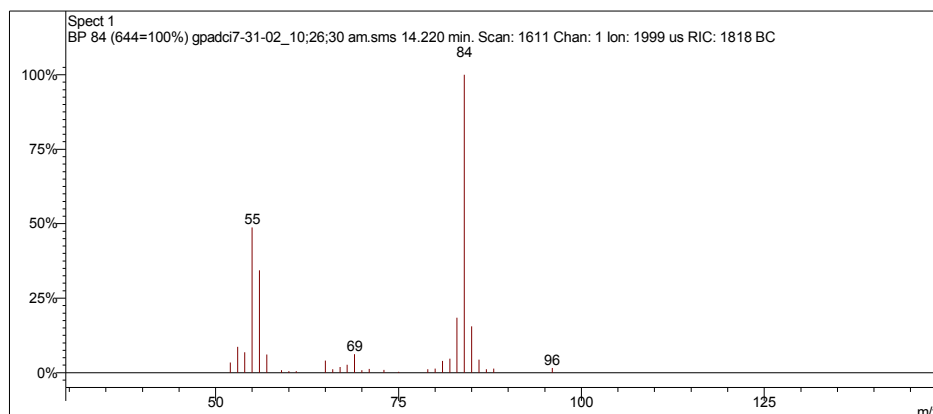
Scan 2374 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 2374, Time: 18.971 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 18.971 min. Scan: 2374 Chan: 1 Ion: 855 us RIC: 23003
Pair Count: 31 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1611 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 1611, Time: 14.220 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 14.220 min. Scan: 1611 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1818 BC
Pair Count: 29 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
84	$[M]^+ = C_6H_{12}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
83	$[M-1]^+ = C_6H_{10}^+$	Perda de hidrogênio.
69	$[M-15]^+ = C_5H_{11}^+$	Perda de metila.
56	$C_4H_8^+$	Perda de C_2H_5 .
55	$C_4H_7^+$	Perda de C_2H_6 .
41	$C_3H_5^+$	Perda de propano. Fragmentação no carbono beta à dupla com rearranjo de hidrogênio.

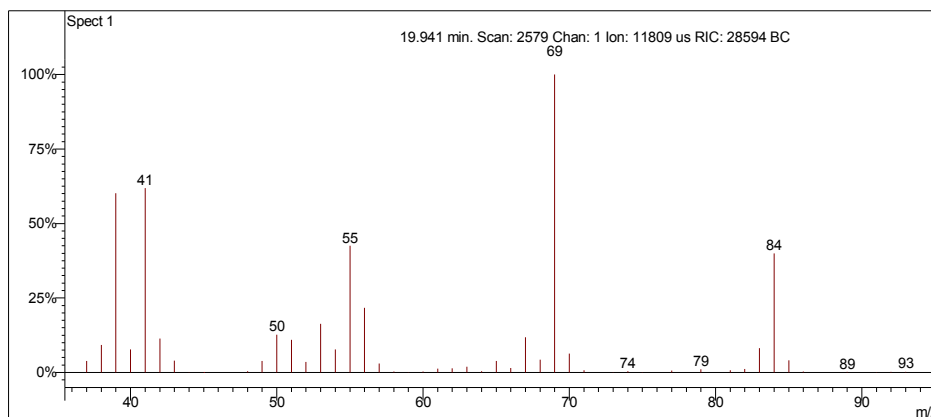
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 85$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_6H_{12} = C_6H_{13}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 84$	Transferência de carga.	Metanol
$CH_3OH^+ + C_6H_{12} = C_6H_{12}^+ + CH_3OH$		

2-etilbut-1-eno

Amostra de Gasolina Comum

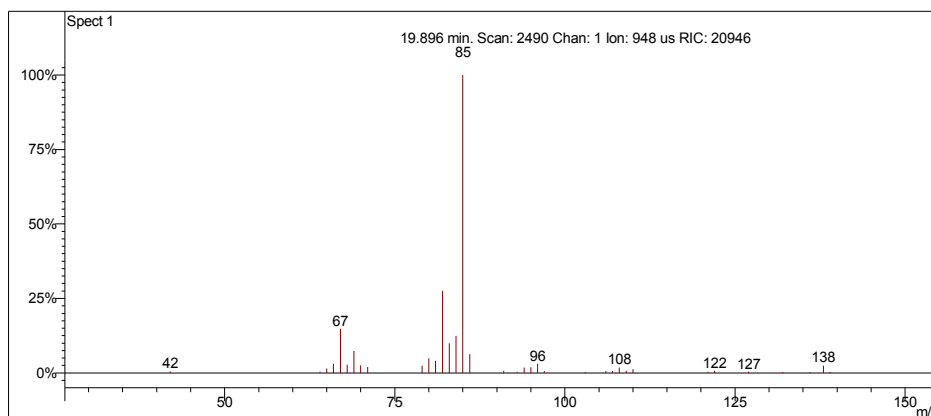
Scan 2579 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 2579, Time: 19.941 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 19.941 min. Scan: 2579 Chan: 1 Ion: 11809 us RIC: 28594 BC
Pair Count: 73 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

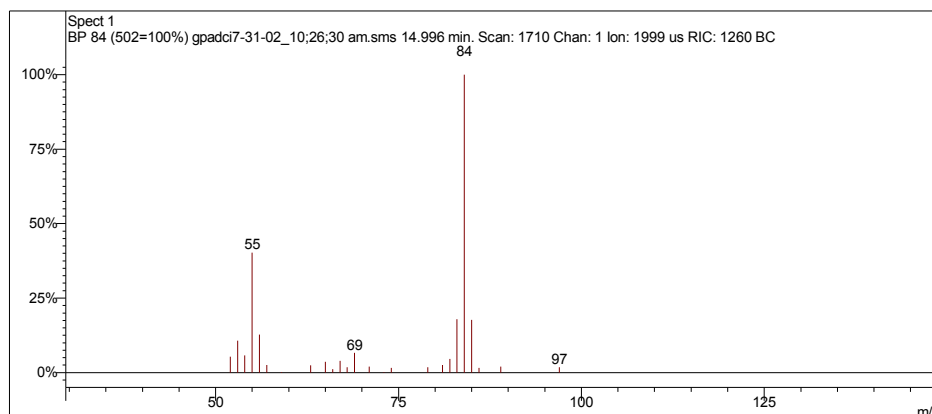
Scan 2490 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 2490, Time: 19.896 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 19.896 min. Scan: 2490 Chan: 1 Ion: 948 us RIC: 20946
Pair Count: 36 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1710 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 1710, Time: 14.996 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 14.996 min. Scan: 1710 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1260 BC
Pair Count: 25 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
84	$[M]^{++} = C_6H_{12}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
69	$[M - 15]^+ = C_5H_9^+$	Fragmentação alílica. Perda de metila. Pico base.
55	$[M - 29]^+ = C_4H_7^+$	Fragmentação alílica. Perda de C_2H_5 .
41	$C_3H_5^+$	Rearranjos de hidrogênio.

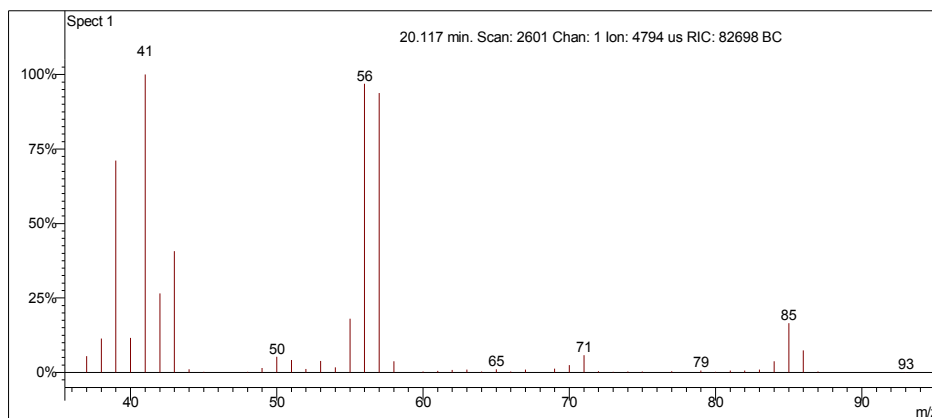
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 85$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_6H_{12} = C_6H_{13}^+ + CH_3CN.$		
$[M+1]^+ = 84$	Transferência de carga.	Metanol
$CH_3OH^+ + C_6H_{12} = C_6H_{12}^+ + CH_3OH.$		

Hexano

Amostra de Gasolina Comum

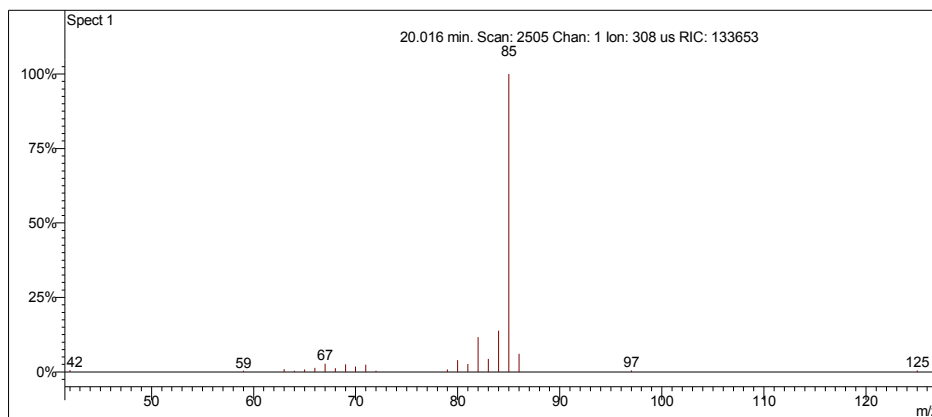
Scan 2601 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 2601, Time: 20.117 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 20.117 min. Scan: 2601 Chan: 1 Ion: 4794 us RIC: 82698 BC
Pair Count: 49 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

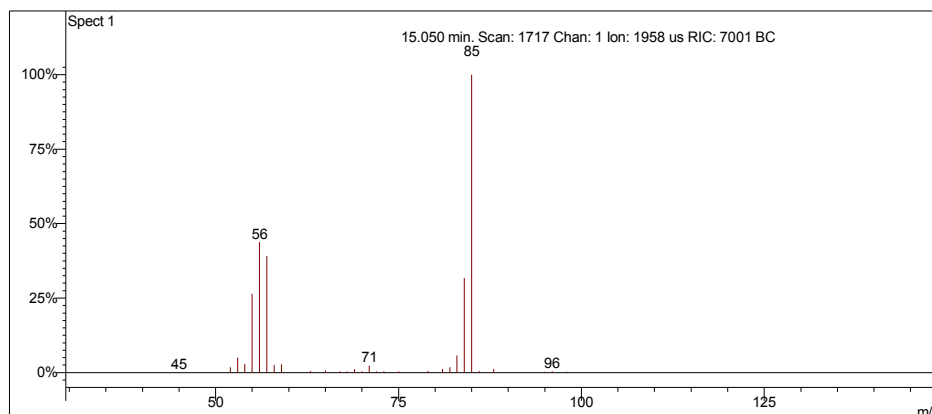
Scan 2505 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 2505, Time: 20.016 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 20.016 min. Scan: 2505 Chan: 1 Ion: 308 us RIC: 133653
Pair Count: 23 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1717 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 1717, Time: 15.050 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 15.050 min. Scan: 1717 Chan: 1 Ion: 1958 us RIC: 7001 BC
 Pair Count: 32 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
86	$[M]^{++} = C_6H_{14}^+$	Baixa intensidade do íon molecular indica molécula linear.
85	$[M-1]^+ = C_6H_{11}^+$	Perda de hidrogênio.
71	$[M-15]^+ = C_5H_{10}^+$	Perda de metila.
57	$C_4H_9^+$	Perda de C_2H_5 . Fragmentação alílica.
56	$C_4H_8^+$	Perda de C_2H_6 (etano) com rearranjos.
41	$C_3H_5^+$	Rearranjos de hidrogênio.

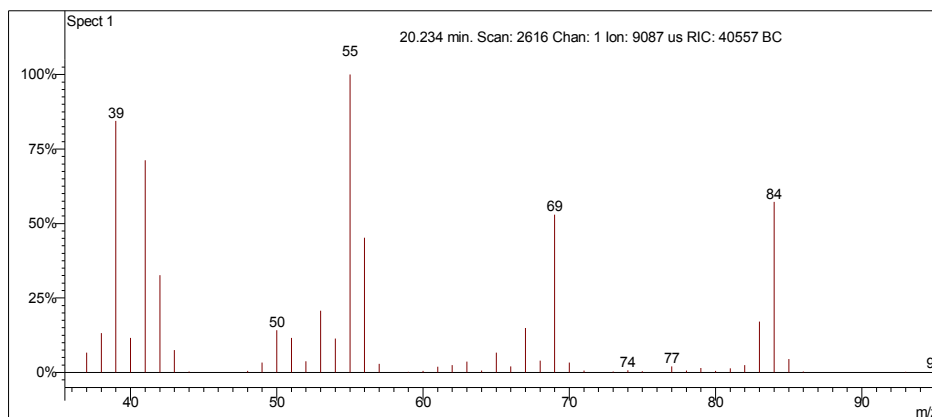
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^+ = 85$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_6H_{14} = C_6H_{13}^+ + CH_3CN$		
$[M-1]^+ = 85$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{++} = CH_2OH^+ + \cdot H$ $CH_2OH^+ + C_6H_{14} = C_6H_{13}^+ + CH_3OH$		

(Z)-Hex-3-eno

Amostra de Gasolina Comum

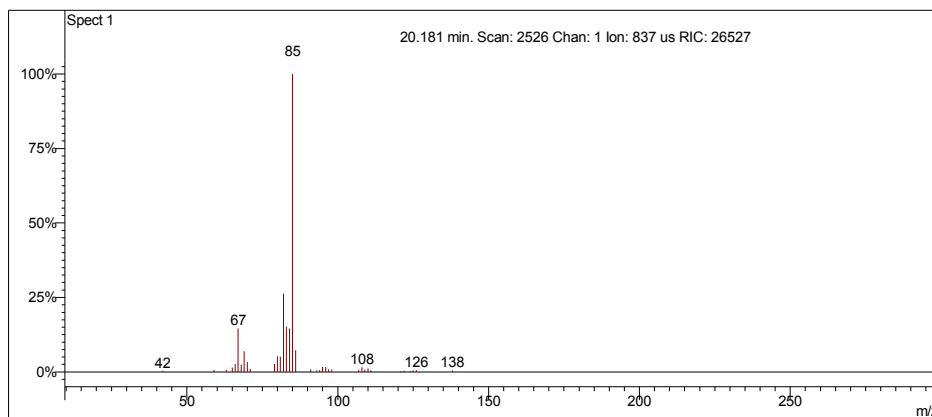
Scan 2616 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 2616, Time: 20.234 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 20.234 min. Scan: 2616 Chan: 1 Ion: 9087 us RIC: 40557 BC
Pair Count: 57 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

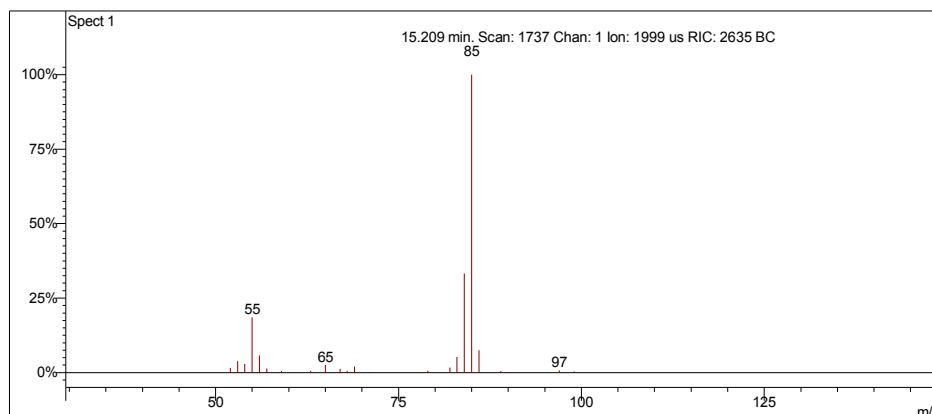
Scan 2526 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciact_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciact_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 2526, Time: 20.181 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 20.181 min. Scan: 2526 Chan: 1 Ion: 837 us RIC: 26527
Pair Count: 36 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1737 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 1737, Time: 15.209 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 15.209 min. Scan: 1737 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 2635 BC
 Pair Count: 25 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
84	$[M]^{++} = C_6H_{12}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica
69	$[M - 15]^+ = C_5H_9^+$	Perda de metila.
55	$[M - 29]^+ = C_4H_7^+$	Fragmentação alílica. Perda de C_2H_5 . Pico base.
41	$C_3H_5^+$	Rearranjos de hidrogênio.

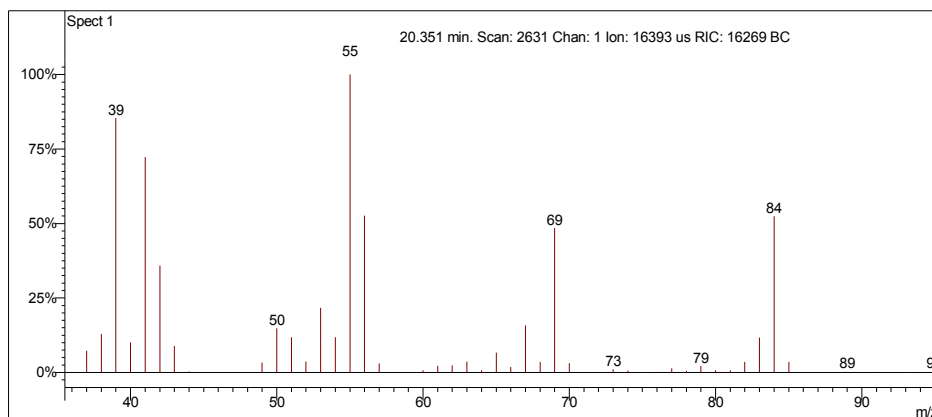
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 85$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_6H_{12} = C_6H_{13}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 85$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_6H_{12} = C_6H_{13}^+ + CH_3OH$		

(E)-Hex-3-eno

Amostra de Gasolina Comum

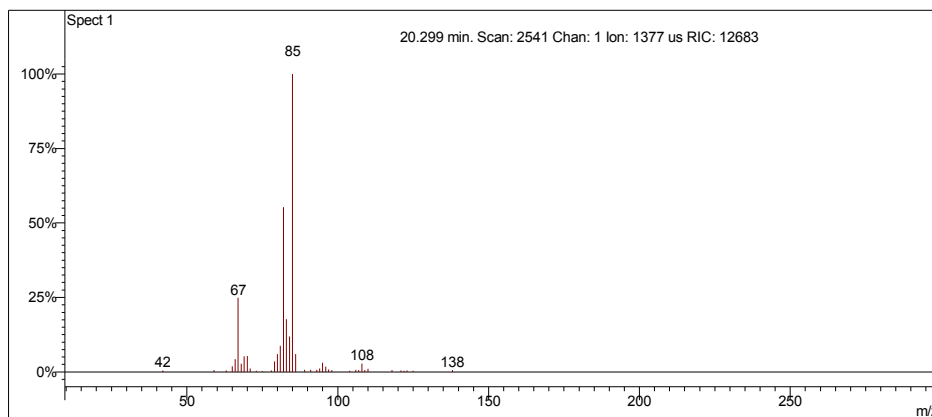
Scan 2631 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 2631, Time: 20.351 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 20.351 min. Scan: 2631 Chan: 1 Ion: 16393 us RIC: 16269 BC
Pair Count: 70 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

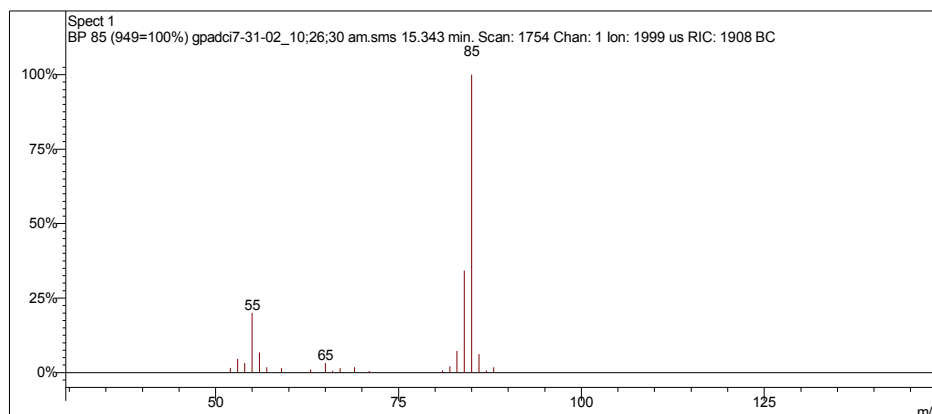
Scan 2541 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 2541, Time: 20.299 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 20.299 min. Scan: 2541 Chan: 1 Ion: 1377 us RIC: 12683
Pair Count: 41 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1754 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 1754, Time: 15.343 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 15.343 min. Scan: 1754 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1908 BC
 Pair Count: 21 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
84	$[M]^{+} = C_6H_{12}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
69	$[M-15]^{+} = C_5H_9^{+}$	Perda de metila.
55	$[M-29]^{+} = C_4H_7^{+}$	Fragmentação alílica. Perda de C_2H_5 . Pico base.
41	$C_3H_5^{+}$	Rearranjos de hidrogênio.

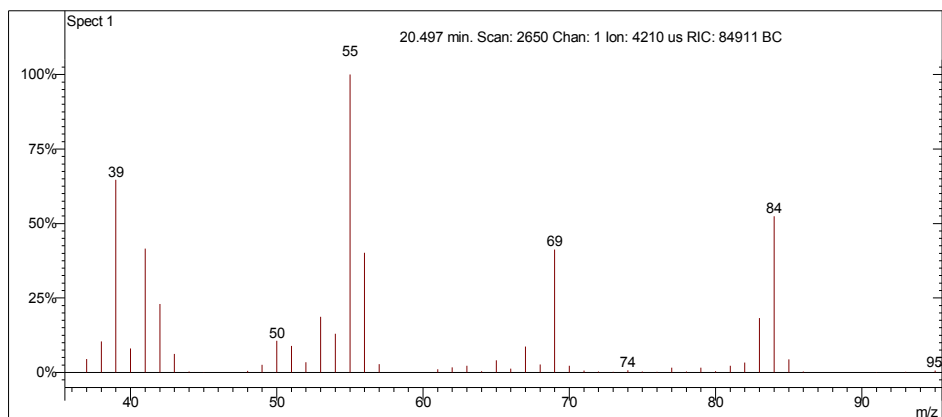
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 85$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_6H_{12} = C_6H_{13}^{+} + CH_3CN$		
$[M+1]^{+} = 85$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{+} + CH_3OH = CH_3OH_2^{+} + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^{+} + C_6H_{12} = C_6H_{13}^{+} + CH_3OH$		

(E)-Hex-2-eno

Amostra de Gasolina Comum

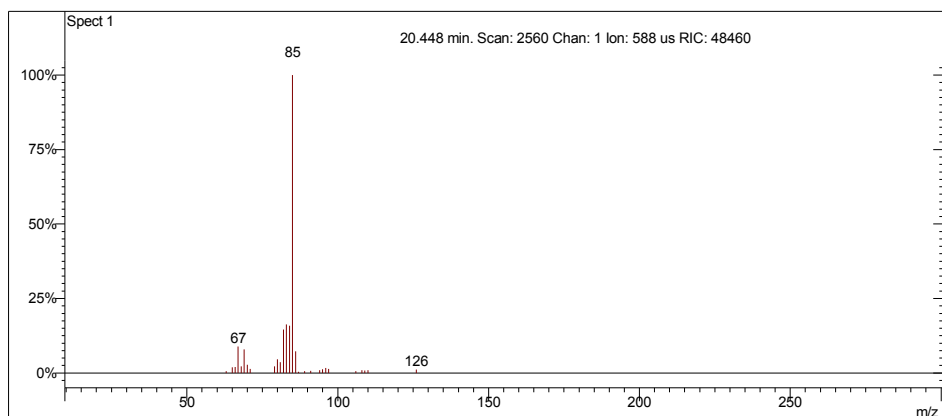
Scan 2650 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 2650, Time: 20.497 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 20.497 min. Scan: 2650 Chan: 1 Ion: 4210 us RIC: 84911 BC
Pair Count: 53 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

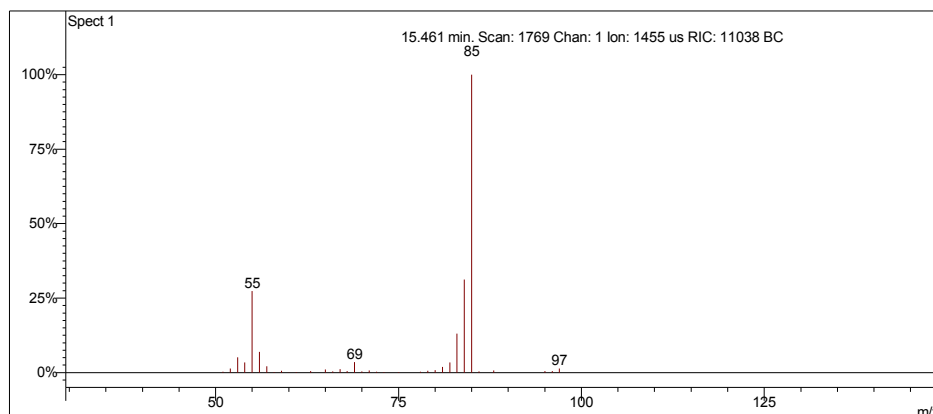
Scan 2560 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 2560, Time: 20.448 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 20.448 min. Scan: 2560 Chan: 1 Ion: 588 us RIC: 48460
Pair Count: 28 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1769 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 1769, Time: 15.461 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 15.461 min. Scan: 1769 Chan: 1 Ion: 1455 us RIC: 11038 BC
 Pair Count: 35 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
84	$[M]^{+} = C_6H_{12}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
69	$[M - 15]^{+} = C_5H_9^{+}$	Perda de metila.
55	$[M - 29]^{+} = C_4H_7^{+}$	Fragmentação alílica. Perda de C_2H_5 . Pico base.
41	$C_3H_5^{+}$	Perda de propila.

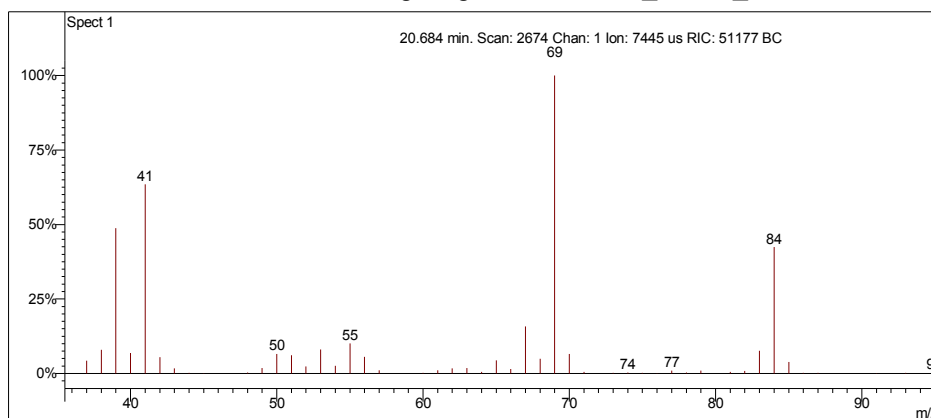
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 85$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_6H_{12} = C_6H_{13}^{+} + CH_3CN$		
$[M+1]^{+} = 85$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{+} + CH_3OH = CH_3OH_2^{+} + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^{+} + C_6H_{12} = C_6H_{13}^{+} + CH_3OH$		

2-metilpent-2-eno

Amostra de Gasolina Comum

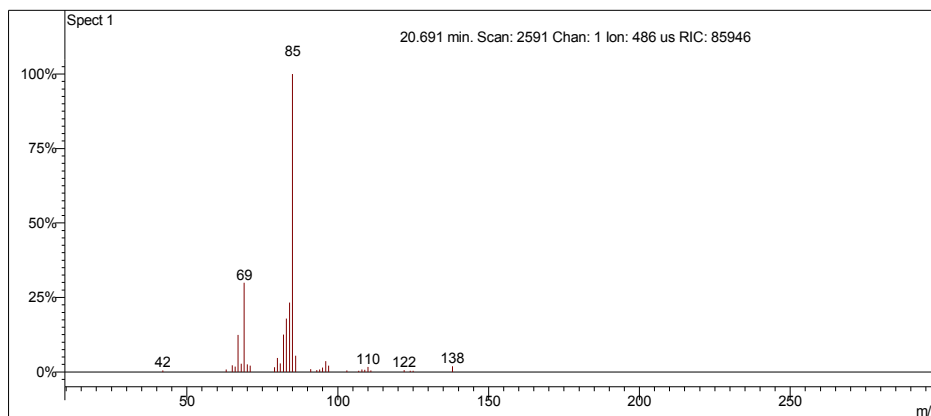
Scan 2674 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 2674, Time: 20.684 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 20.684 min. Scan: 2674 Chan: 1 Ion: 7445 us RIC: 51177 BC
Pair Count: 58 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

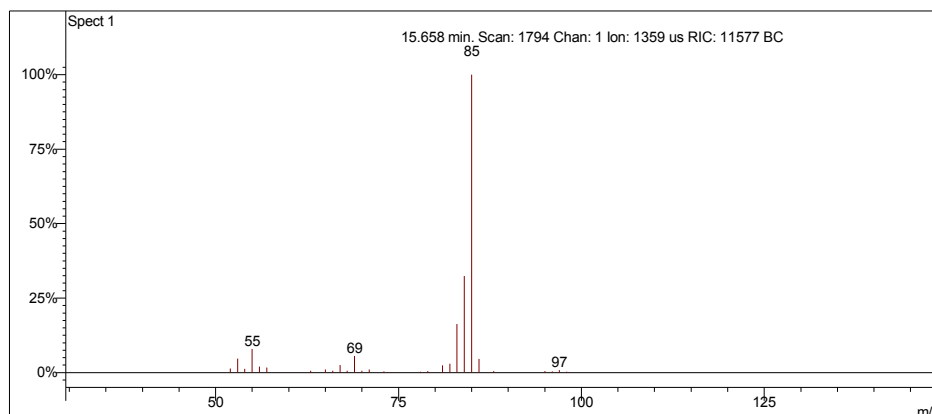
Scan 2591 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 2591, Time: 20.691 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 20.691 min. Scan: 2591 Chan: 1 Ion: 486 us RIC: 85946
Pair Count: 33 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1794 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 1794, Time: 15.658 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 15.658 min. Scan: 1794 Chan: 1 Ion: 1359 us RIC: 11577 BC
 Pair Count: 34 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
84	$[M]^{+} = C_6H_{12}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
69	$[M - 15]^{+} = C_5H_9^{+}$	Perda de metila. Pico base.
55	$[M - 29]^{+} = C_4H_7^{+}$	Fragmentação alílica. Perda de C_2H_5 .
41	$C_3H_5^{+}$	Perda de propila.

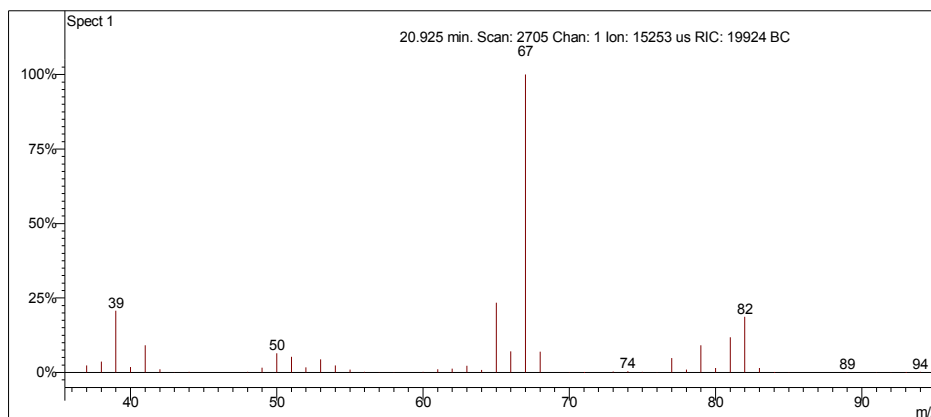
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 85$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_6H_{12} = C_6H_{13}^{+} + CH_3CN$		
$[M+1]^{+} = 85$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{+} + CH_3OH = CH_3OH_2^{+} + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^{+} + C_6H_{12} = C_6H_{13}^{+} + CH_3OH$		

4-metilciclopenteno

Amostra de Gasolina Comum

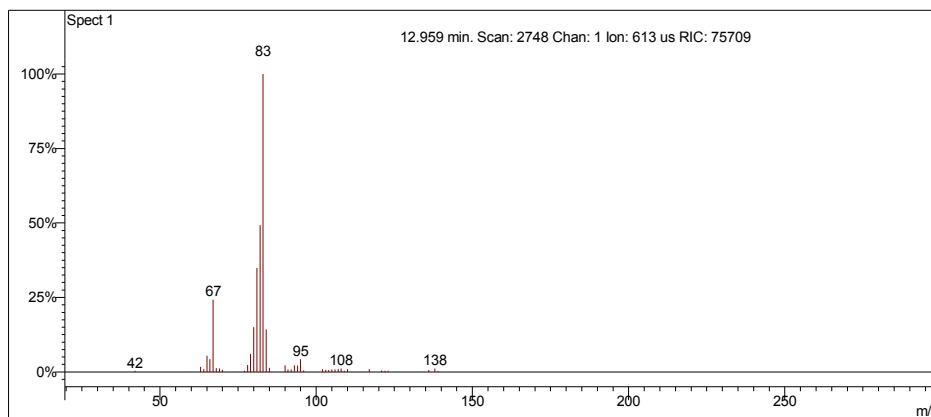
Scan 2705 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 2705, Time: 20.925 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 20.925 min. Scan: 2705 Chan: 1 Ion: 15253 us RIC: 19924 BC
Pair Count: 68 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

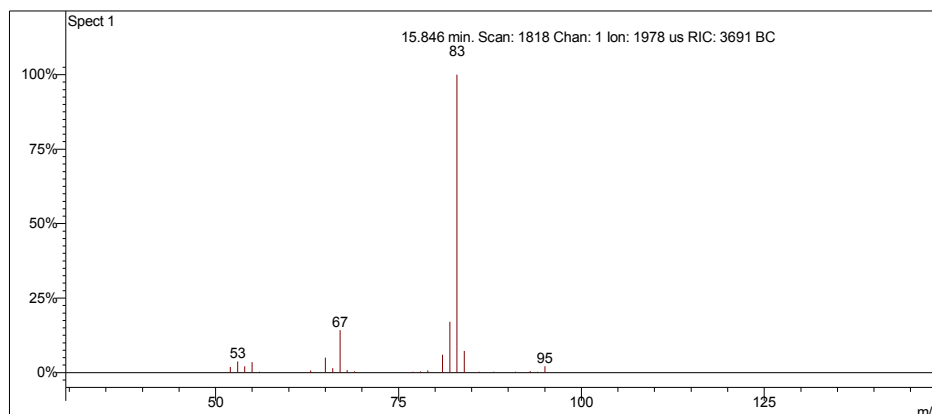
Scan 2748 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms
Scan No: 2748, Time: 12.959 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 12.959 min. Scan: 2748 Chan: 1 Ion: 613 us RIC: 75709
Pair Count: 41 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1818 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 1818, Time: 15.846 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 15.846 min. Scan: 1818 Chan: 1 Ion: 1978 us RIC: 3691 BC
Pair Count: 26 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
82	$[M]^{++} = C_6H_{10}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
67	$[M - 15]^+ = C_5H_7^+$	Perda de metila. Pico base.

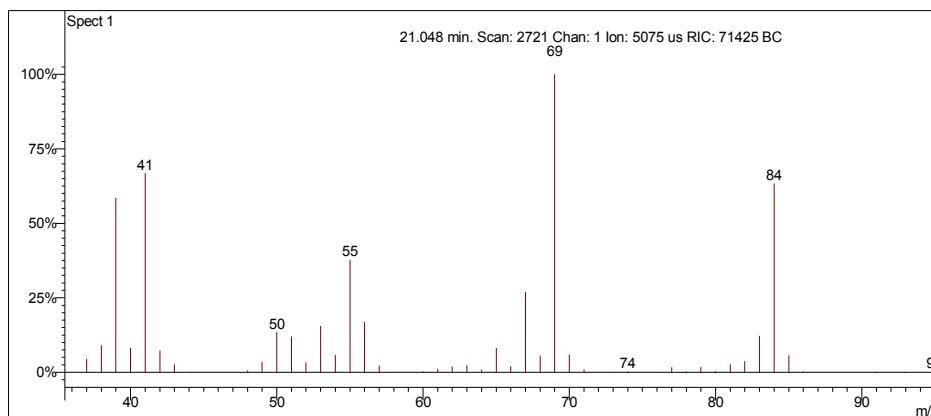
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 83$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_6H_{10} = C_6H_{11}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 83$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_6H_{10} = C_6H_{11}^+ + CH_3OH$		

(E)-3-metilpent-2-eno

Amostra de Gasolina Comum

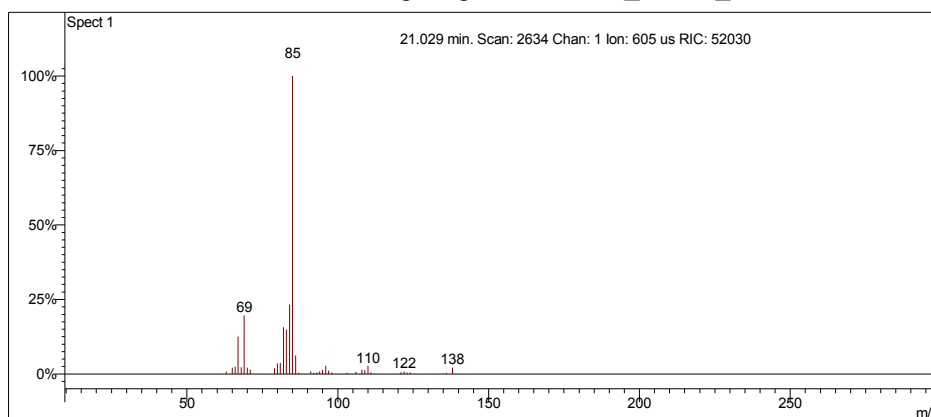
Scan 2721 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 2721, Time: 21.048 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 21.048 min. Scan: 2721 Chan: 1 Ion: 5075 us RIC: 71425 BC
Pair Count: 49 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

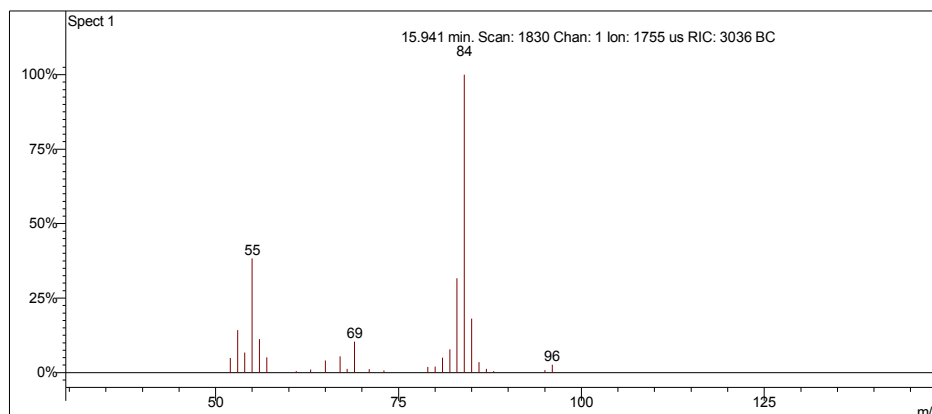
Scan 2634 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 2634, Time: 21.029 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 21.029 min. Scan: 2634 Chan: 1 Ion: 605 us RIC: 52030
Pair Count: 37 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1830 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 1830, Time: 15.941 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 15.941 min. Scan: 1830 Chan: 1 Ion: 1755 us RIC: 3036 BC
Pair Count: 29 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
84	$[M]^{+} = C_6H_{12}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
69	$[M - 15]^{+} = C_5H_9^{+}$	Fragmentação alílica. Perda de metila. Pico base.
55	$[M - 29]^{+} = C_4H_7^{+}$	Fragmentação alílica. Perda de C_2H_5 .
41	$C_3H_5^{+}$	Perda de propila com rearranjos.

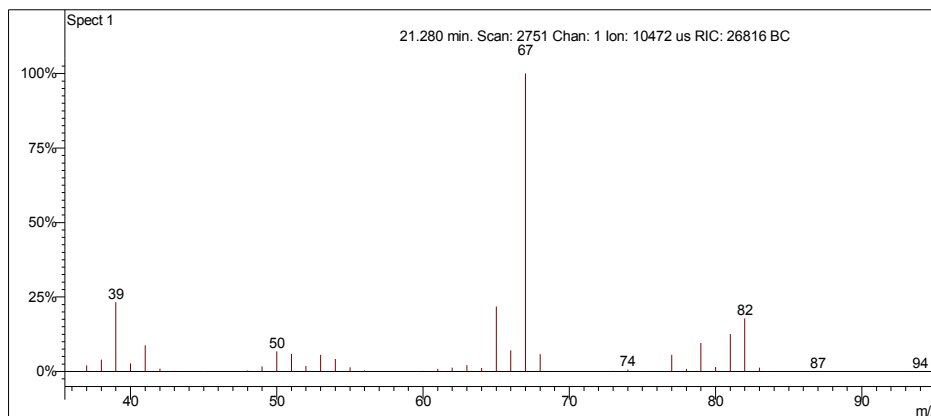
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 85$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_6H_{12} = C_6H_{13}^{+} + CH_3CN$		
$[M+1]^{+} = 84$	Transferência de carga.	Metanol
$CH_3OH^{+} + C_6H_{12} = C_6H_{12}^{+} + CH_3OH$		

3-metilciclopenteno

Amostra de Gasolina Comum

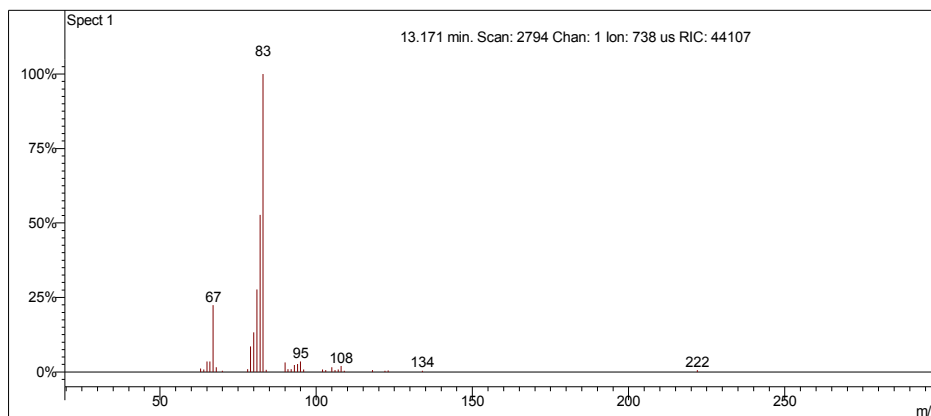
Scan 2751 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 2751, Time: 21.280 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 21.280 min. Scan: 2751 Chan: 1 Ion: 10472 us RIC: 26816 BC
Pair Count: 60 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

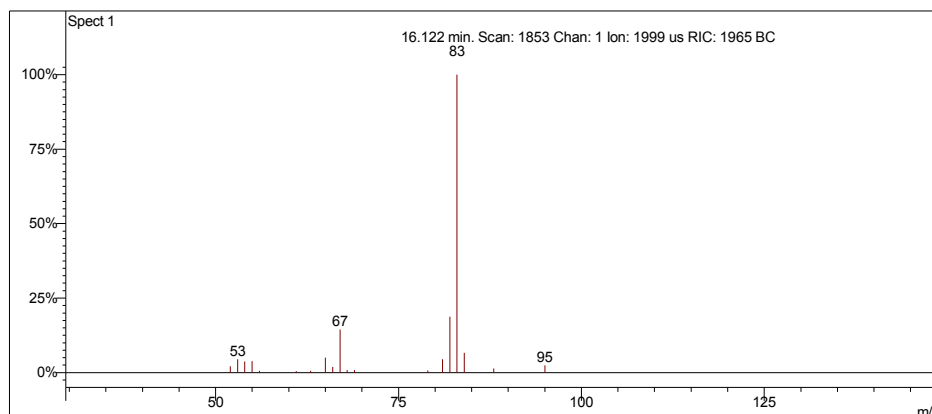
Scan 2794 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms
Scan No: 2794, Time: 13.171 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 13.171 min. Scan: 2794 Chan: 1 Ion: 738 us RIC: 44107
Pair Count: 33 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1853 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 1853, Time: 16.122 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 16.122 min. Scan: 1853 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1965 BC
 Pair Count: 19 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
82	$[M]^{+} = C_6H_{10}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
67	$[M - 15]^{+} = C_5H_7^{+}$	Perda de metila. Pico base.

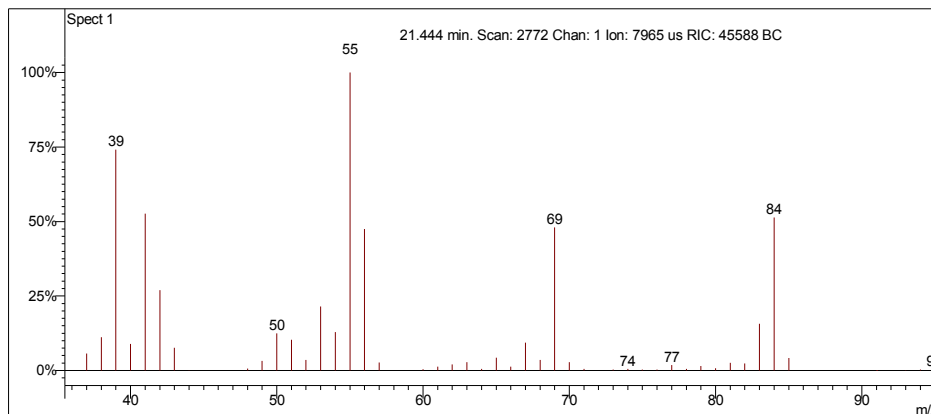
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 83$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_6H_{10} = C_6H_{11}^{+} + CH_3CN$		
$[M+1]^{+} = 83$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{+} + CH_3OH = CH_3OH_2^{+} + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^{+} + C_6H_{10} = C_6H_{11}^{+} + CH_3OH$		

(Z)-Hex-2-eno

Amostra de Gasolina Comum

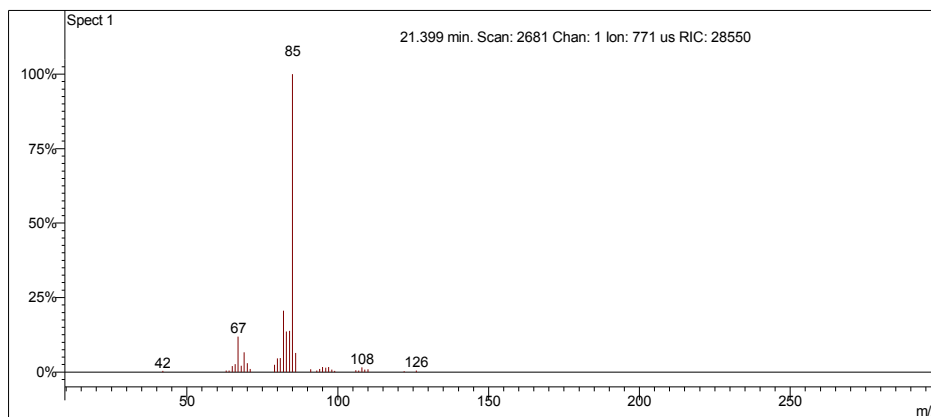
Scan 2772 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 2772, Time: 21.444 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 21.444 min. Scan: 2772 Chan: 1 Ion: 7965 us RIC: 45588 BC
Pair Count: 59 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

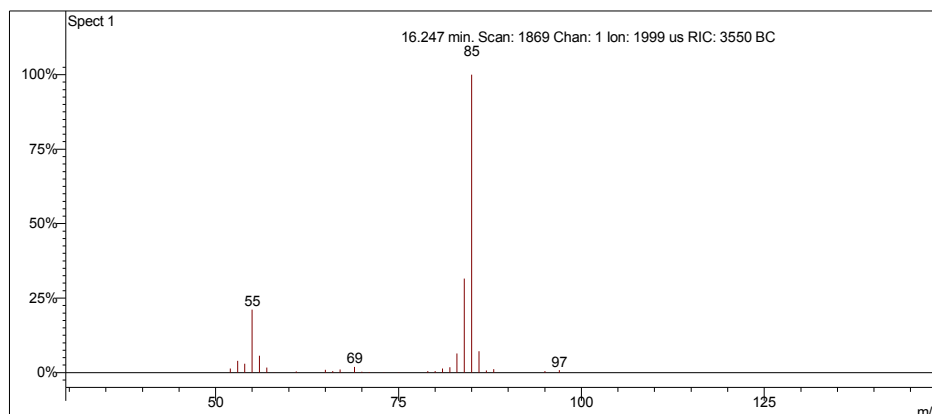
Scan 2681 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 2681, Time: 21.399 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 21.399 min. Scan: 2681 Chan: 1 Ion: 771 us RIC: 28550
Pair Count: 33 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1869 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 1869, Time: 16.247 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 16.247 min. Scan: 1869 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 3550 BC
 Pair Count: 28 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
84	$[M]^{++} = C_6H_{12}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
69	$[M - 15]^+ = C_5H_9^+$	Perda de metila.
55	$[M - 29]^+ = C_4H_7^+$	Fragmentação alílica. Perda de C_2H_5 . Pico base.
41	$C_3H_5^+$	Perda de propila.

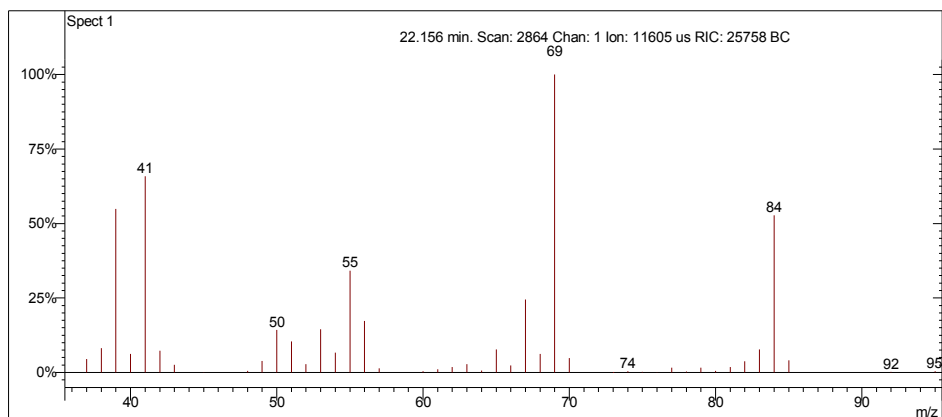
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 85$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_6H_{12} = C_6H_{13}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 85$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_6H_{12} = C_6H_{13}^+ + CH_3OH$		

(Z)-3-metilpent-2-eno

Amostra de Gasolina Comum

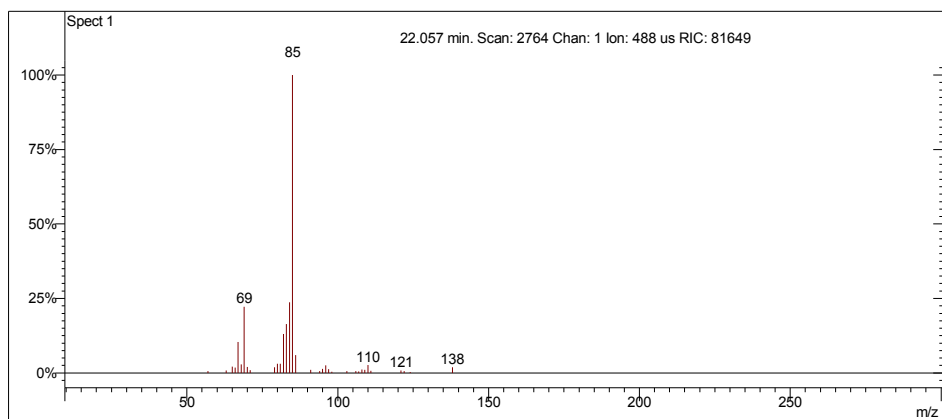
Scan 2864 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 2864, Time: 22.156 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 22.156 min. Scan: 2864 Chan: 1 Ion: 11605 us RIC: 25758 BC
Pair Count: 59 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

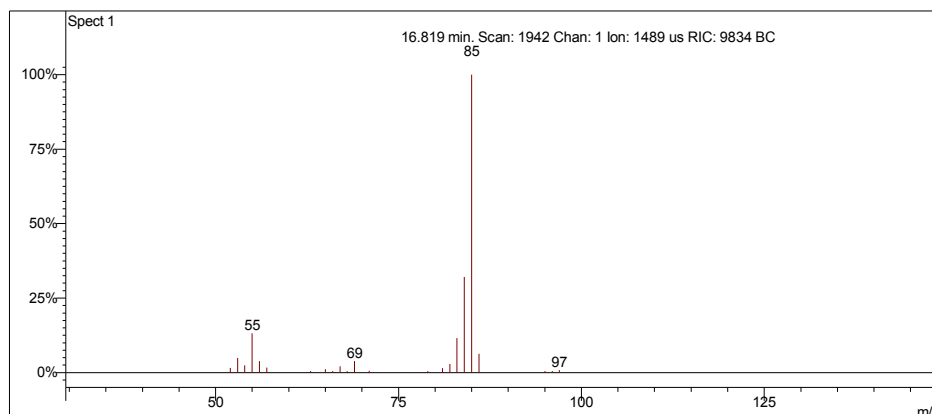
Scan 2764 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 2764, Time: 22.057 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 22.057 min. Scan: 2764 Chan: 1 Ion: 488 us RIC: 81649
Pair Count: 34 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 1942 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 1942, Time: 16.819 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 16.819 min. Scan: 1942 Chan: 1 Ion: 1489 us RIC: 9834 BC
 Pair Count: 31 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
84	$[M]^{+\bullet} = C_6H_{12}^{+\bullet}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
69	$[M - 15]^{+\bullet} = C_5H_9^{+\bullet}$	Perda de metila.
55	$[M - 29]^{+\bullet} = C_4H_7^{+\bullet}$	Fragmentação alílica. Perda de etila (C_2H_5). Pico base.
41	$C_3H_5^{+\bullet}$	Perda de propila com rearranjos.

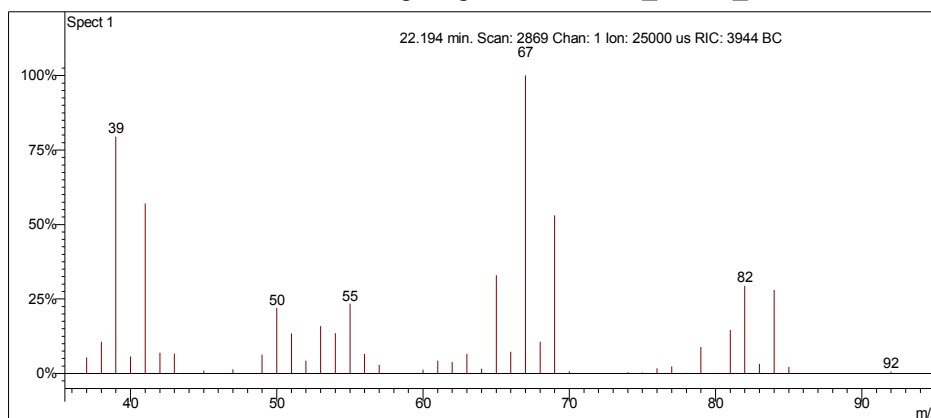
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+\bullet} = 85$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+\bullet} + CH_3CN = CH_3CNH^{+\bullet} + \bullet CH_2CN$ $CH_3CNH^{+\bullet} + C_6H_{12} = C_6H_{13}^{+\bullet} + CH_3CN$		
$[M+1]^{+\bullet} = 85$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{+\bullet} + CH_3OH = CH_3OH_2^{+\bullet} + \bullet CH_2OH$ $CH_3OH_2^{+\bullet} + C_6H_{12} = C_6H_{13}^{+\bullet} + CH_3OH$		

2,3-dimetilbuta-1,3-dieno

Amostra de Gasolina Comum

Scan 2869 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 2869, Time: 22.194 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 22.194 min. Scan: 2869 Chan: 1 Ion: 25000 us RIC: 3944 BC
Pair Count: 75 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Sem sinal – quantidade desprezível.

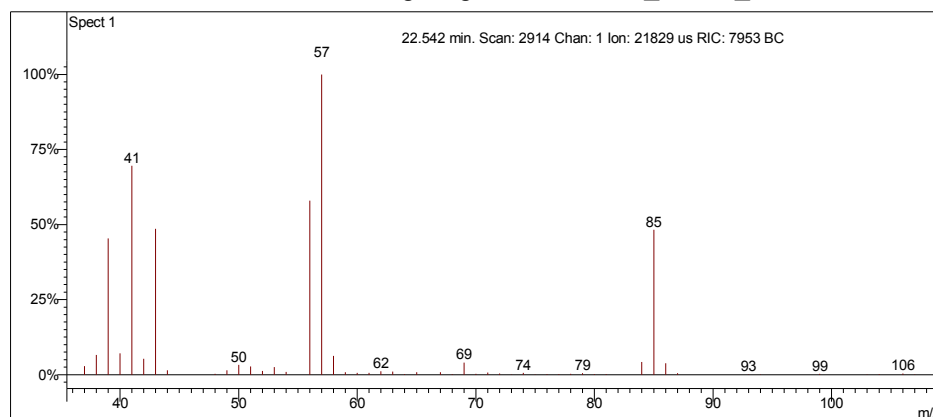
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
82	$[M]^{+} = C_6H_{10}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
67	$[M - 15]^{+} = C_5H_7^{+}$	Perda de metila. Pico base.
55	$C_4H_7^{+}$	Fragmentação alílica. Perda de C_2H_3 .
41	$C_3H_5^{+}$	Fragmentação entre os carbonos terciários.

2,2-dimetilpentano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 2914 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 2914, Time: 22.542 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 22.542 min. Scan: 2914 Chan: 1 Ion: 21829 us RIC: 7953 BC
Pair Count: 87 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Sem sinal – quantidade desprezível.

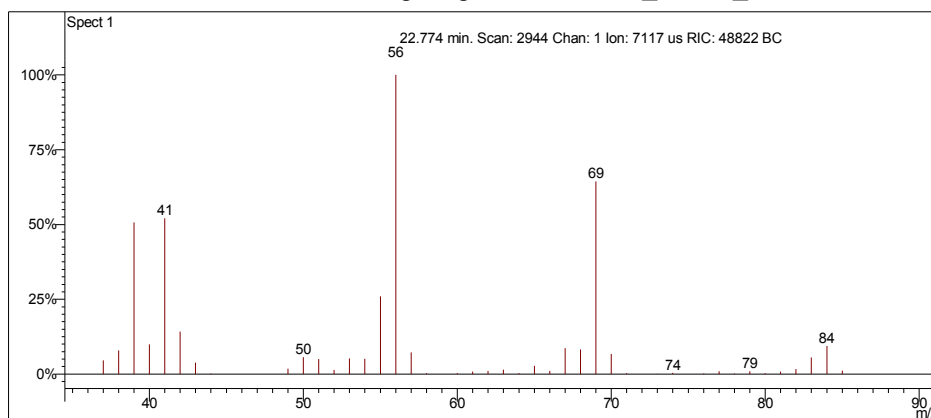
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
100 (ausente)	$[M]^{+} = C_7H_{16}^{+}$	Baixa intensidade do íon molecular indica molécula linear.
85	$[M - 15]^{+} = C_6H_{13}^{+}$	Perda de metila.
57	$C_4H_9^{+}$	Fragmentação alílica com perda de propila.
43	$C_3H_7^{+}$	Fragmentação alílica com perda de neo butila, acompanhado de rearranjos de hidrogênio para formação do carbocátion.
41	$C_3H_5^{+}$	Fragmentação alílica com perda de isobutila.
39	$C_3H_3^{+}$	Fragmentação alílica com perda de isobutila e rearranjos de hidrogênio para formação do carbocátion.

Metilciclopentano

Amostra de Gasolina Comum

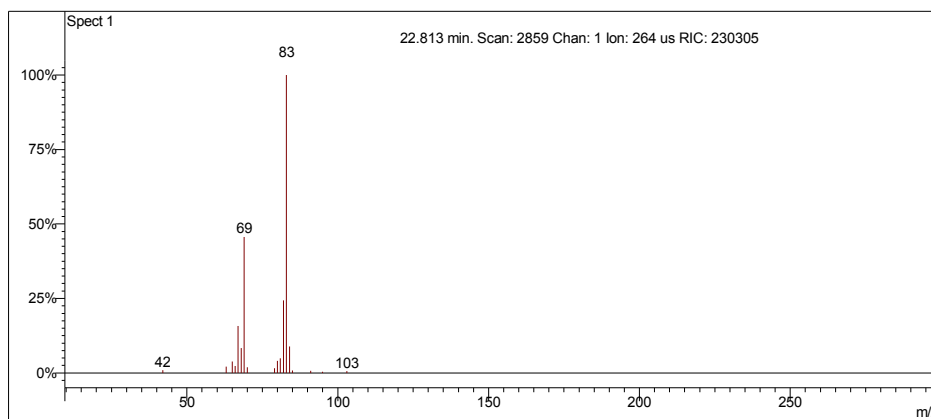
Scan 2944 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 2944, Time: 22.774 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 22.774 min. Scan: 2944 Chan: 1 Ion: 7117 us RIC: 48822 BC
Pair Count: 54 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

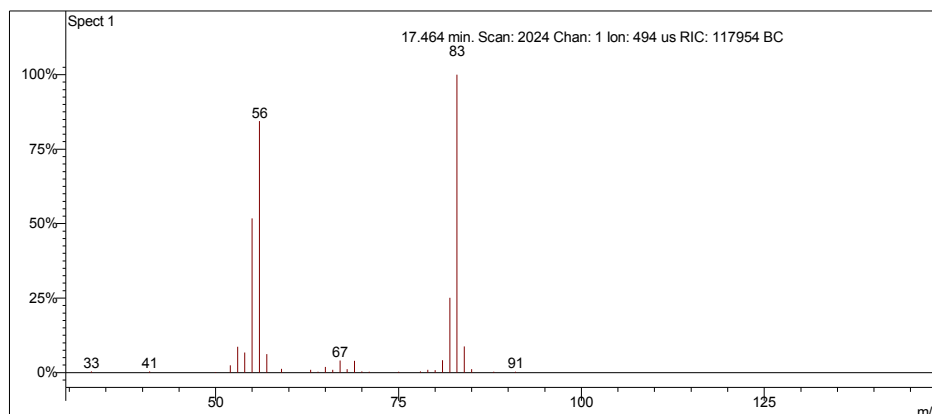
Scan 2859 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 2859, Time: 22.813 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 22.813 min. Scan: 2859 Chan: 1 Ion: 264 us RIC: 230305
Pair Count: 18 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 2024 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 2024, Time: 17.464 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 17.464 min. Scan: 2024 Chan: 1 Ion: 494 us RIC: 117954 BC
Pair Count: 30 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
84	$[M]^{++} = C_6H_{12}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
69	$[M - 15]^+ = C_5H_9^+$	Perda de metila.
56	$[M - 28]^+ = C_4H_8^+$	Fragmentação alílica. Perda de eteno. Pico base.
41	$C_3H_5^+$	Perda de propila com rearranjos.

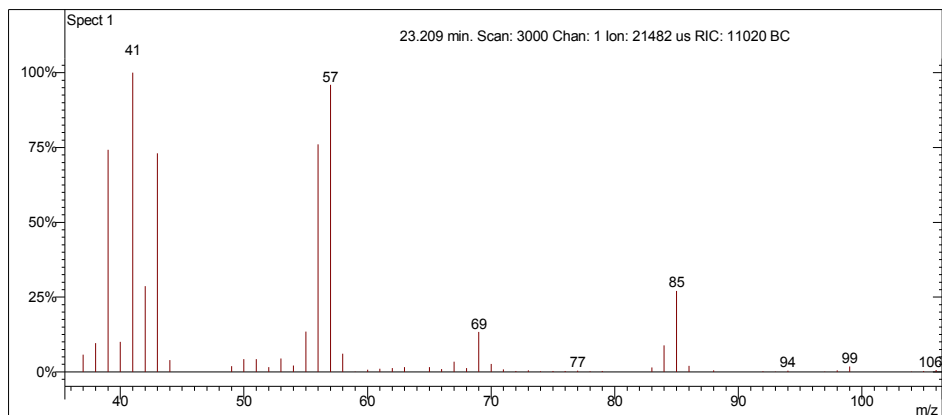
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M - 1]^+ = 83$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_6H_{12} = C_6H_{11}^+ + CH_3CN$		
$[M - 1]^+ = 83$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{++} = CH_2OH^+ + \cdot H$ $CH_2OH^+ + C_6H_{12} = C_6H_{11}^+ + CH_3OH$		

2,4-dimetilpentano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 3000 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 3000, Time: 23.209 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 23.209 min. Scan: 3000 Chan: 1 Ion: 21482 us RIC: 11020 BC
Pair Count: 81 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Apesar de ter uma quantidade suficiente para que ocorra a ionização química (IC), esta substância apresenta instabilidade e ionização de outros íons que não o molecular. Devem-se alterar as condições de IC somente para este tipo de molécula, levando-se em conta que a mesma é altamente fragmentável.

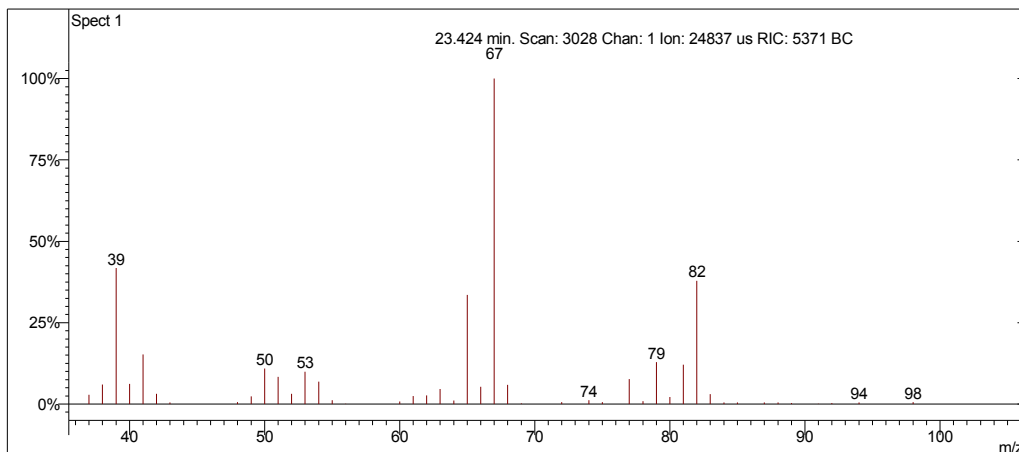
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
100 (ausente)	$[M]^{++} = C_7H_{16}^+$	Baixa intensidade do íon molecular indica molécula linear.
85	$[M - 15]^+ = C_6H_{13}^+$	Perda de metila.
57	$C_4H_9^+$	Fragmentação alílica com perda de isopropila.
43	$C_3H_7^+$	Fragmentação alílica com perda de isobutila, acompanhado de rearranjos de hidrogênio para formação do carbocátion.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação alílica com perda de isobutila, acompanhado de rearranjos de hidrogênio para formação do carbocátion.
39	$C_3H_3^+$	Fragmentação alílica com perda de isobutila, acompanhado de rearranjos de hidrogênio para formação do carbocátion.

Desconhecido 2

Amostra de Gasolina Comum

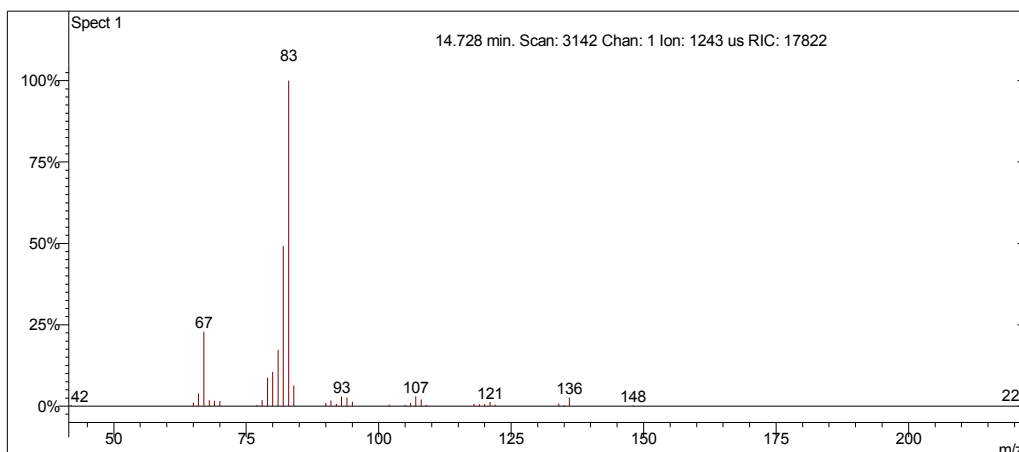
Scan 3028 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 3028, Time: 23.424 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 23.424 min. Scan: 3028 Chan: 1 Ion: 24837 us RIC: 5371 BC
Pair Count: 84 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

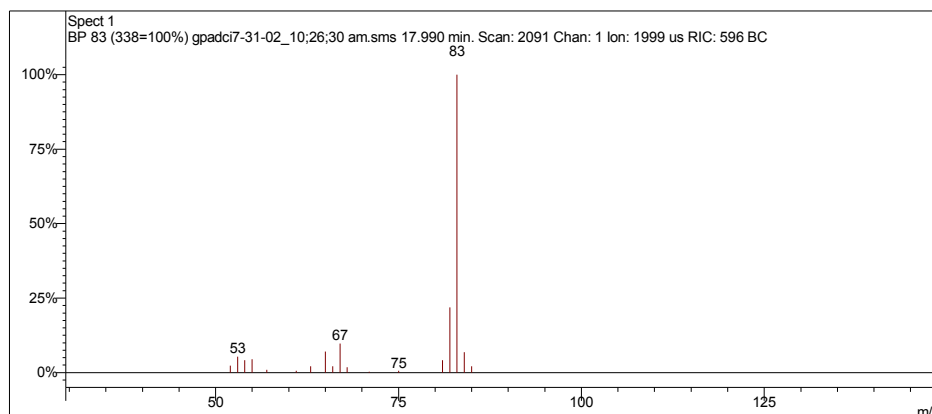
Scan 3142 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms
Scan No: 3142, Time: 14.728 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 14.728 min. Scan: 3142 Chan: 1 Ion: 1243 us RIC: 17822
Pair Count: 37 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 2091 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 2091, Time: 17.990 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 17.990 min. Scan: 2091 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 596 BC
 Pair Count: 18 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
82	$[M]^{++} = C_6H_{10}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância, confirmado por ionização química.
81	$[M - 1]^+ = C_6H_9^+$	Perda de hidrogênio.
67	$[M - 15]^+ = C_5H_7^+$	Perda de metila. Pico base.
Conclusão: a substância pode ser classificada como olefínico com 6 carbonos (dieno).		

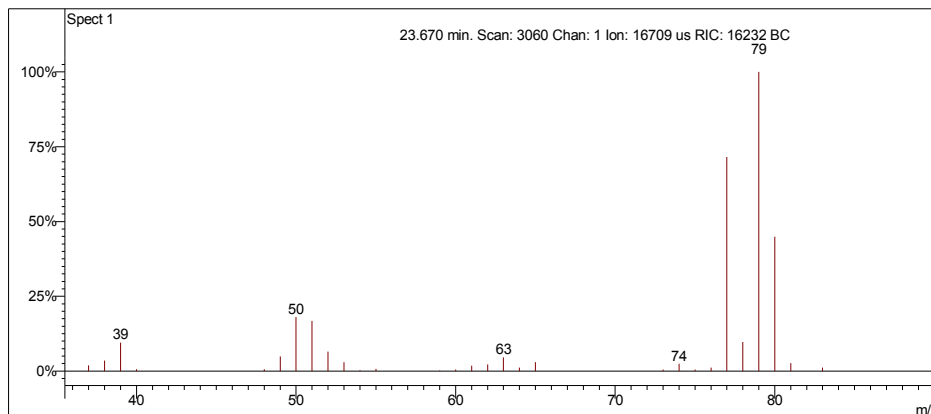
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 83$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_6H_{10} = C_6H_{11}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 83$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_6H_{10} = C_6H_{11}^+ + CH_3OH$		

Cicloexa-1,3-dieno

Amostra de Gasolina Comum

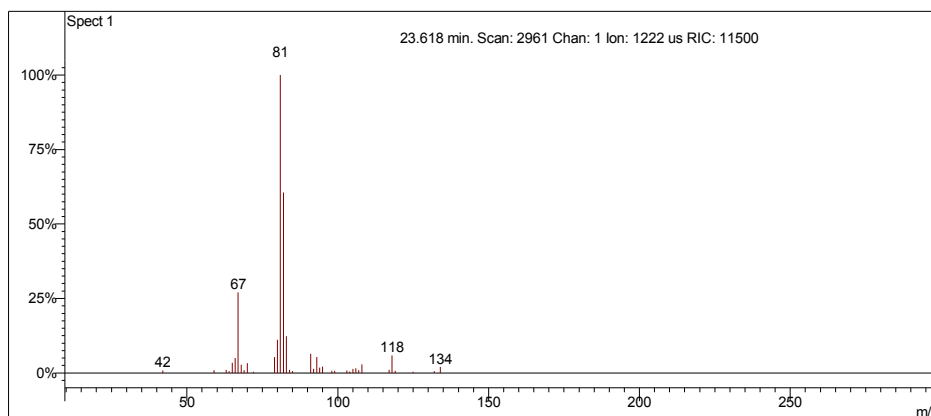
Scan 3060 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 3060, Time: 23.670 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 23.670 min. Scan: 3060 Chan: 1 Ion: 16709 us RIC: 16232 BC
Pair Count: 59 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

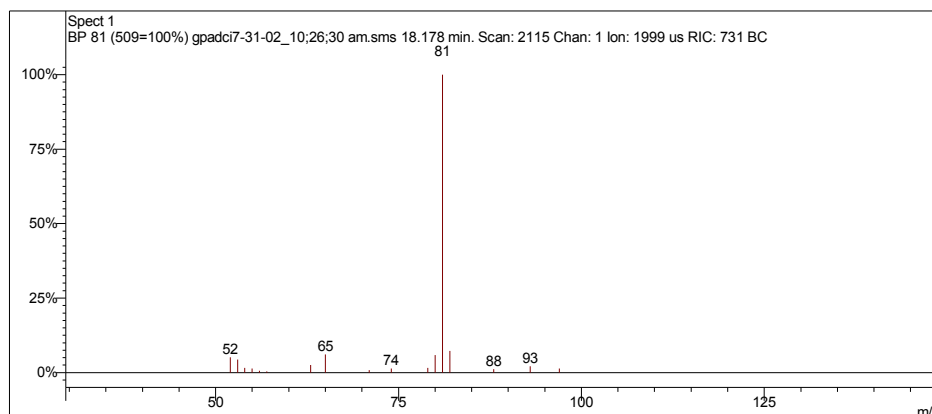
Scan 2961 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 2961, Time: 23.618 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 23.618 min. Scan: 2961 Chan: 1 Ion: 1222 us RIC: 11500
Pair Count: 37 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 2115 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 2115, Time: 18.178 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 18.178 min. Scan: 2115 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 731 BC
 Pair Count: 17 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
80	$[M]^{++} = C_6H_8^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
79	$[M - 1]^+ = C_6H_7^+$	Perda de hidrogênio. Pico base.
51	$[M - 29]^+ = C_4H_5^+$	Fragmentação do anel com perda de C_2H_3 .

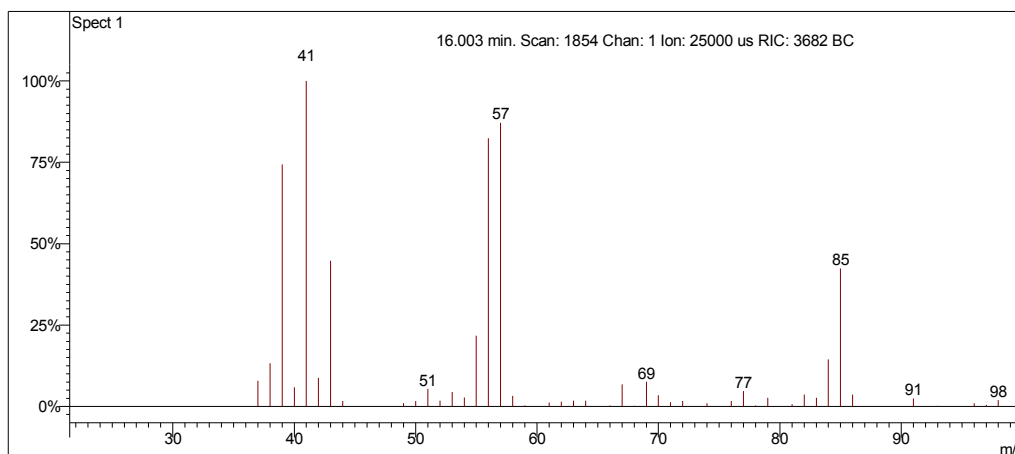
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 81$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_6H_8 = C_6H_9^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 81$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_6H_8 = C_6H_9^+ + CH_3OH$		

2,2,3-trimetilbutano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 1854 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 1854, Time: 16.003 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 16.003 min. Scan: 1854 Chan: 1 Ion: 25000 us RIC: 3682 BC
Pair Count: 77 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 150

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Quantidade desprezível.

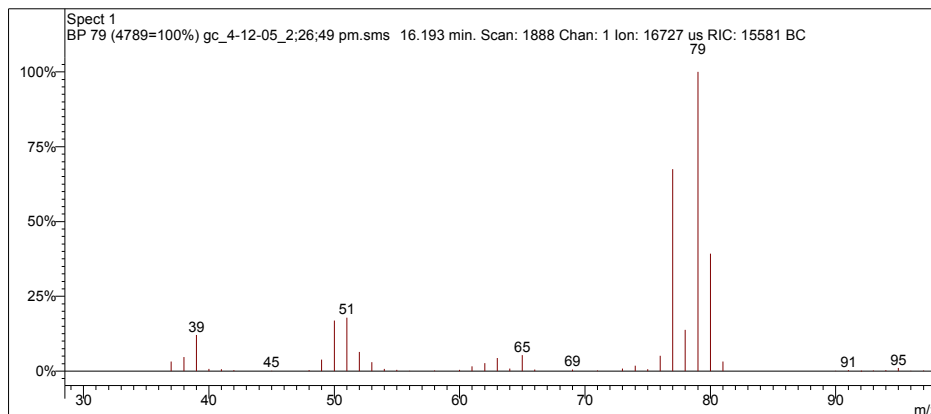
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
100 (ausente)	$[M]^{+•} = C_7H_{16}^{+}$	Baixa intensidade do íon molecular indica molécula linear.
85	$[M - 15]^{+} = C_6H_{13}^{+}$	Perda de metila.
57	$C_4H_9^{+}$	Fragmentação alílica com perda de isopropila.
43	$C_3H_7^{+}$	Fragmentação alílica com perda de isobutila.
41	$C_3H_5^{+}$	Fragmentação alílica com perda de isobutila, acompanhado de rearranjos de hidrogênio para formação do carbocátion.
39	$C_3H_3^{+}$	Fragmentação alílica com perda de isobutila, acompanhado de rearranjos de hidrogênio para formação do carbocátion.

Metilciclopenta-1,3-dieno

Amostra de Gasolina Comum

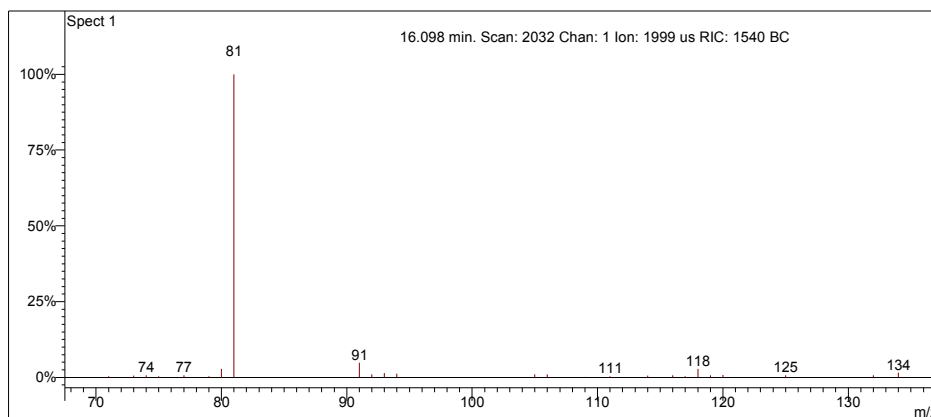
Scan 1888 from c:\... \doutorado\amostras\cgms\gc_4-12-05_2;26;49 pm.sms



Spectrum from c:\... \amostras\cgms\gc_4-12-05_2;26;49 pm.sms
Scan No: 1888, Time: 16.193 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 16.193 min. Scan: 1888 Chan: 1 Ion: 16727 us RIC: 15581 BC
Pair Count: 65 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 150

Ionização Química com Acetonitrila

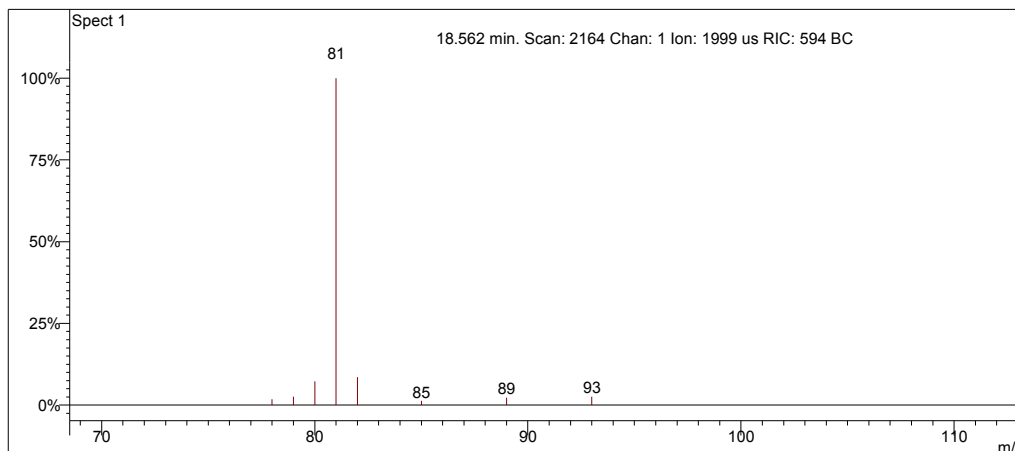
Scan 2032 from c:\... \amostras\cgms\gasa_ci_acn_12-19-05_11_18_17 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasa_ci_acn_12-19-05_11_18_17 am.sms
Scan No: 2032, Time: 16.098 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 16.098 min. Scan: 2032 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1540 BC
Pair Count: 27 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 2164 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 2164, Time: 18.562 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 18.562 min. Scan: 2164 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 594 BC
Pair Count: 20 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
80	$[M]^{++} = C_6H_8^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
79	$[M - 1]^+ = C_6H_7^+$	Perda de hidrogênio. Pico base.
51	$[M - 29]^+ = C_4H_5^+$	Fragmentação do anel com perda de C_2H_3 .

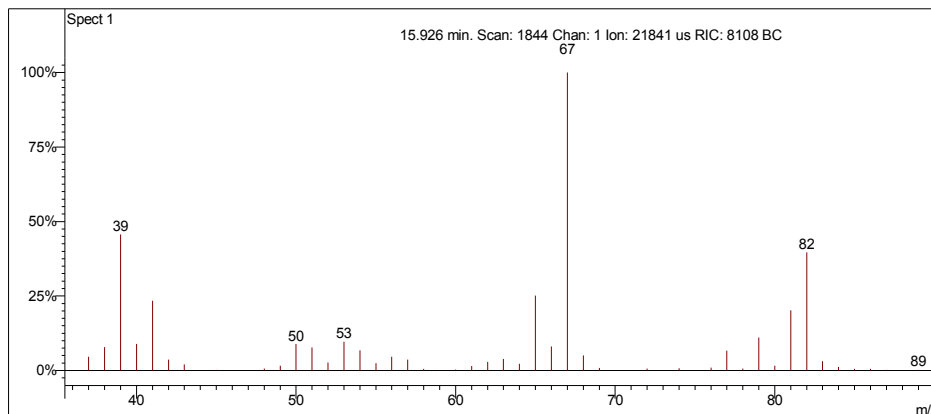
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 81$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_6H_8 = C_6H_9^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 81$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_6H_8 = C_6H_9^+ + CH_3OH$		

Hexa-1,4-dieno

Amostra de Gasolina Comum

Scan 1844 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 1844, Time: 15.926 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 15.926 min. Scan: 1844 Chan: 1 Ion: 21841 us RIC: 8108 BC
Pair Count: 76 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 150

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Quantidade desprezível.

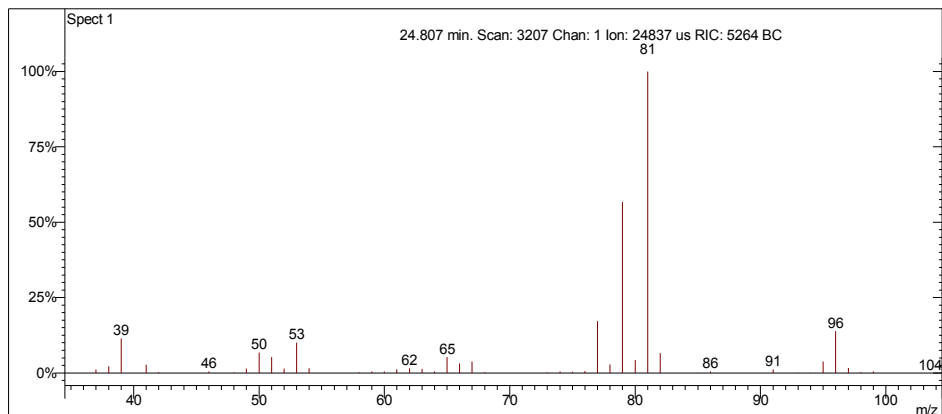
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
82	$[M]^{+} = C_6H_{10}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
81	$[M - 1]^{+} = C_6H_9^{+}$	Perda de hidrogênio.
67	$[M - 15]^{+} = C_5H_7^{+}$	Perda de metila. Pico base.

3,5-dimetilciclopenteno

Amostra de Gasolina Comum

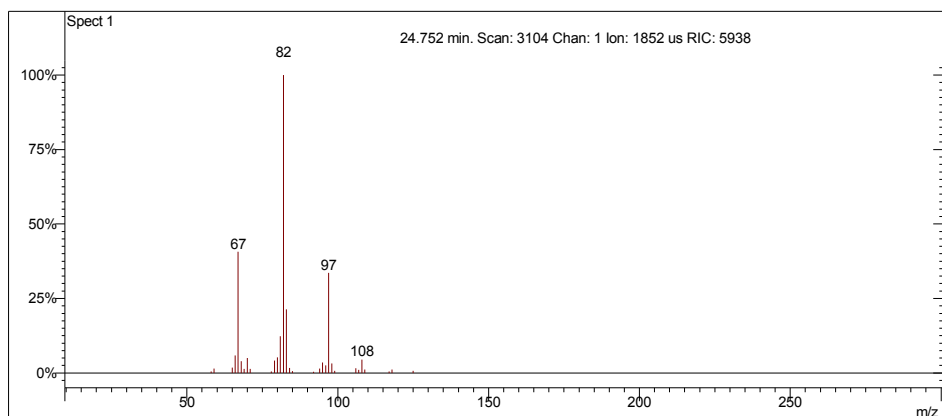
Scan 3207 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 3207, Time: 24.807 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 24.807 min. Scan: 3207 Chan: 1 Ion: 24837 us RIC: 5264 BC
Pair Count: 74 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila (fraca)

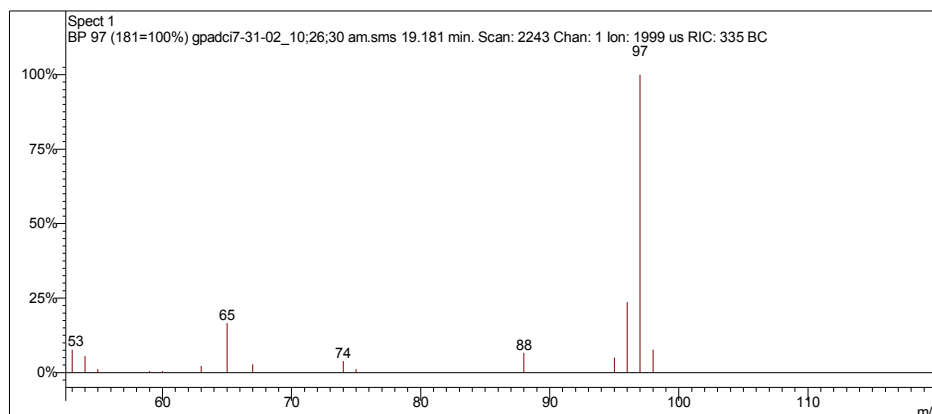
Scan 3104 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 3104, Time: 24.752 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 24.752 min. Scan: 3104 Chan: 1 Ion: 1852 us RIC: 5938
Pair Count: 31 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 2243 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 2243, Time: 19.181 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 19.181 min. Scan: 2243 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 335 BC
Pair Count: 15 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
96	$[M]^{+} = C_7H_{12}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
81	$[M - 15]^{+} = C_6H_9^{+}$	Perda de metila. Pico base.
79	$C_6H_7^{+}$	Perda de metila acompanhada de rearranjos de hidrogênio.
53	$C_4H_5^{+}$	Fragmentação do anel com rearranjos de hidrogênio e perda de propila.

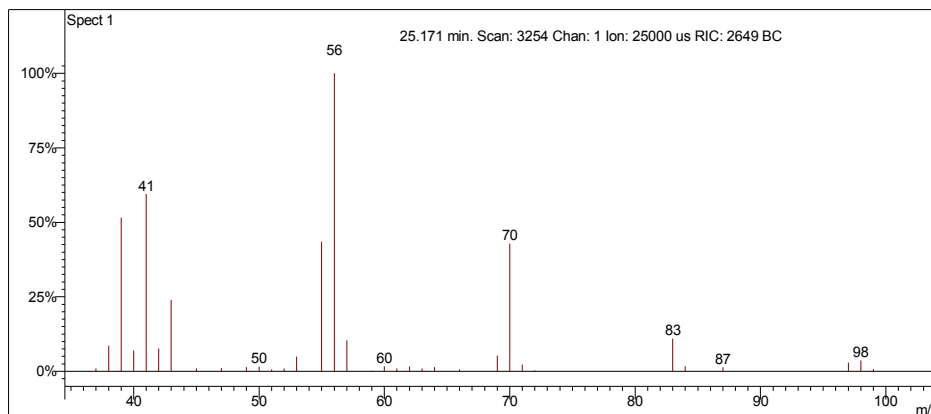
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 97$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_7H_{12} = C_7H_{13}^{+} + CH_3CN$		
$[M+1]^{+} = 97$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{+} + CH_3OH = CH_3OH_2^{+} + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^{+} + C_7H_{12} = C_7H_{13}^{+} + CH_3OH$		

Desconhecido 3

Amostra de Gasolina Comum

Scan 3254 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 3254, Time: 25.171 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 25.171 min. Scan: 3254 Chan: 1 Ion: 25000 us RIC: 2649 BC
Pair Count: 58 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

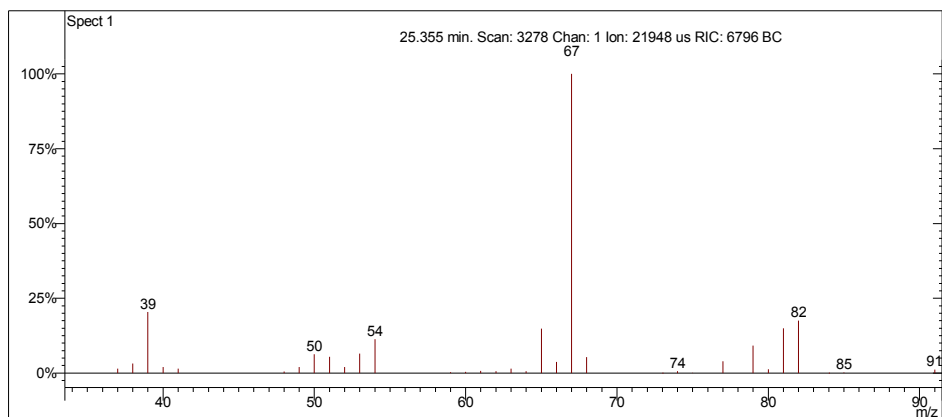
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
98	$[M]^{+} = C_7H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
83	$[M - 15]^{+} = C_6H_{11}^{+}$	Perda de metila.
70	$C_5H_{10}^{+}$	Fragmentação no carbono alfa à dupla ligação.
56	$C_4H_8^{+}$	Fragmentação no carbono beta à dupla ligação com rearranjo de hidrogênio.
Conclusão: a substância pode ser classificada como olefínico com 7 carbonos		

1-metilciclopenteno

Amostra de Gasolina Comum

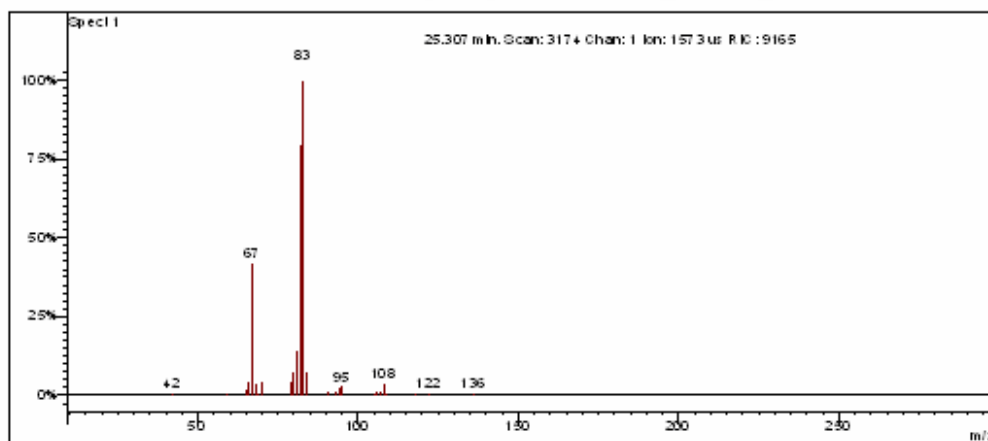
Scan 3278 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 3278, Time: 25.355 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 25.355 min. Scan: 3278 Chan: 1 Ion: 21948 us RIC: 6796 BC
Pair Count: 65 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

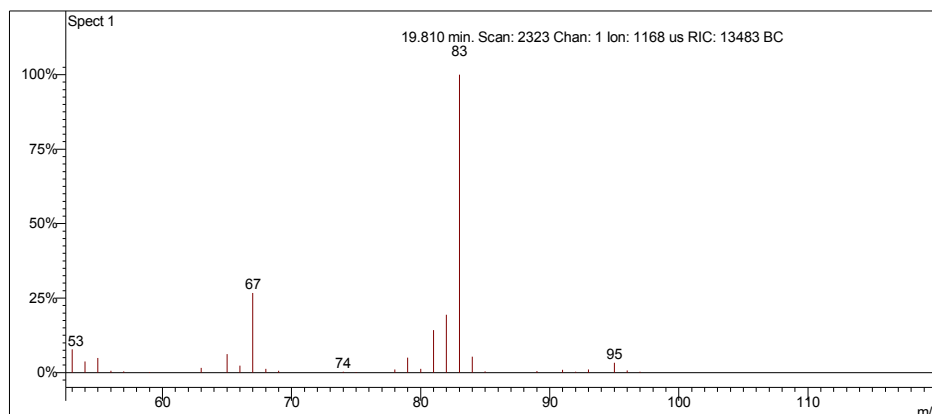
Scan 3174 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 3174, Time: 25.307 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 25.307 min. Scan: 3174 Chan: 1 Ion: 1573 us RIC: 9165
Pair Count: 36 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 2323 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 2323, Time: 19.810 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 19.810 min. Scan: 2323 Chan: 1 Ion: 1168 us RIC: 13483 BC
 Pair Count: 31 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
82	$[M]^{++} = C_6H_{10}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
81	$[M - 1]^+ = C_6H_9^+$	Perda de hidrogênio.
67	$[M - 15]^+ = C_5H_7^+$	Perda de metila. Pico base.
54	$[M - 28]^+ = C_4H_6^+$	Fragmentação do anel com perda de eteno.

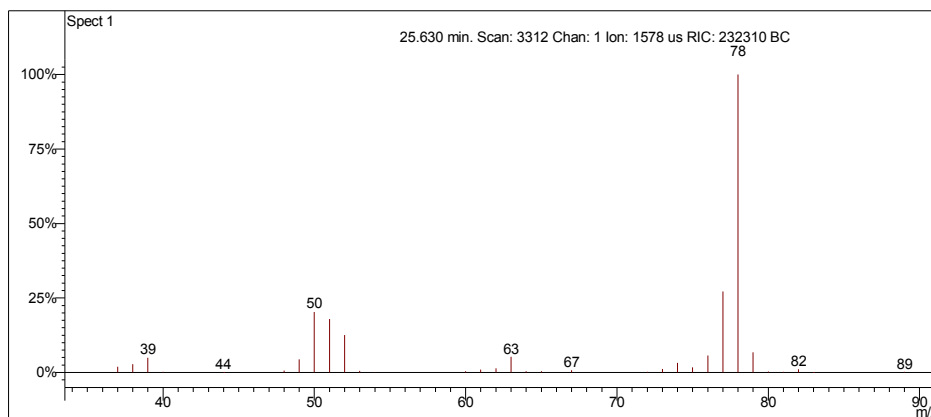
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 83$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_6H_{10} = C_6H_{11}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 83$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_6H_{10} = C_6H_{11}^+ + CH_3OH$		

Benzeno

Amostra de Gasolina Comum

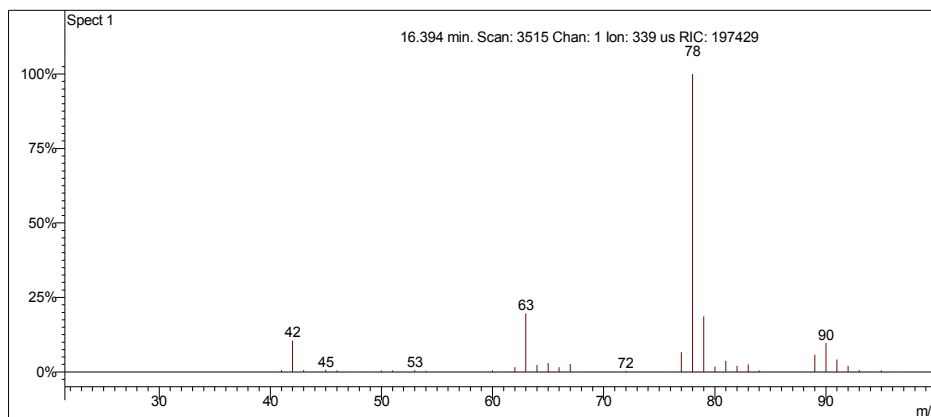
Scan 3312 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 3312, Time: 25.630 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 25.630 min. Scan: 3312 Chan: 1 Ion: 1578 us RIC: 232310 BC
Pair Count: 40 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

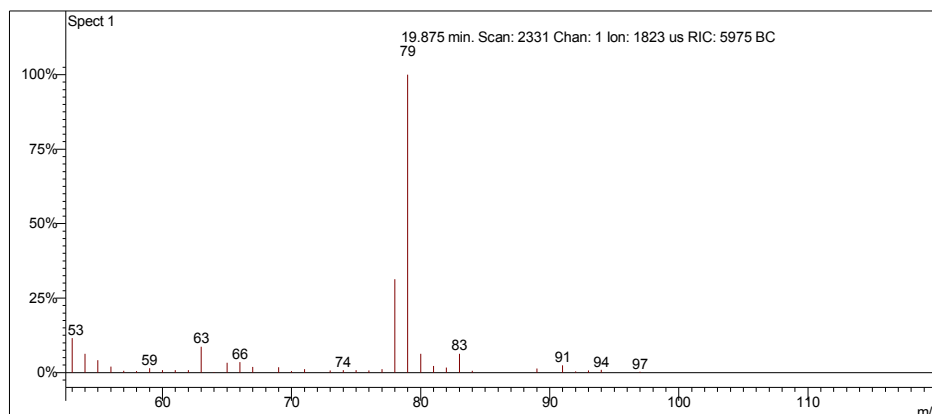
Scan 3515 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms
Scan No: 3515, Time: 16.394 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 16.394 min. Scan: 3515 Chan: 1 Ion: 339 us RIC: 197429
Pair Count: 57 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 2331 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 2331, Time: 19.875 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 19.875 min. Scan: 2331 Chan: 1 Ion: 1823 us RIC: 5975 BC
 Pair Count: 56 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
78	$[M]^{++} = C_6H_6^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica. Pico base indicando molécula muito estável.
77	$[M - 1]^+ = C_6H_5^+$	Perda de hidrogênio.
50	$[M - 28]^+ = C_4H_2^+$	Fragmentação do anel com perda de eteno.

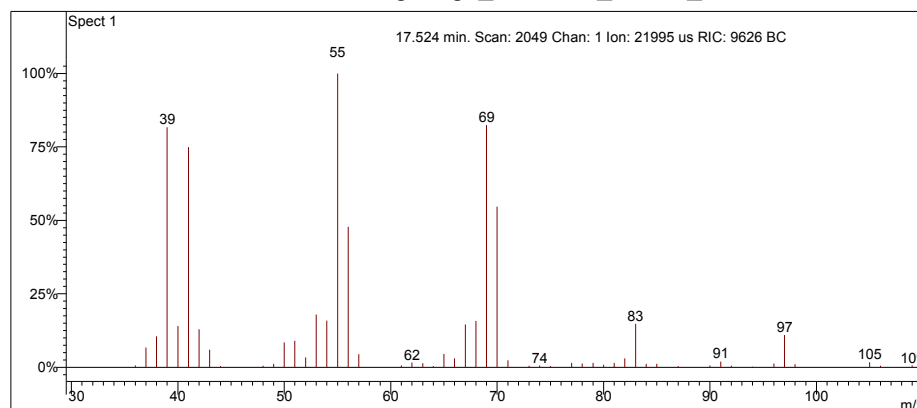
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M]^+ = 78$	Transferência de carga.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + C_6H_6 = C_6H_6^{++} + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 79$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_6H_6 = C_6H_7^+ + CH_3OH$		

3-etilpent-1-eno

Amostra de Gasolina Comum

Scan 2049 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
 Scan No: 2049, Time: 17.524 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 17.524 min. Scan: 2049 Chan: 1 Ion: 21995 us RIC: 9626 BC
 Pair Count: 72 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 150

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

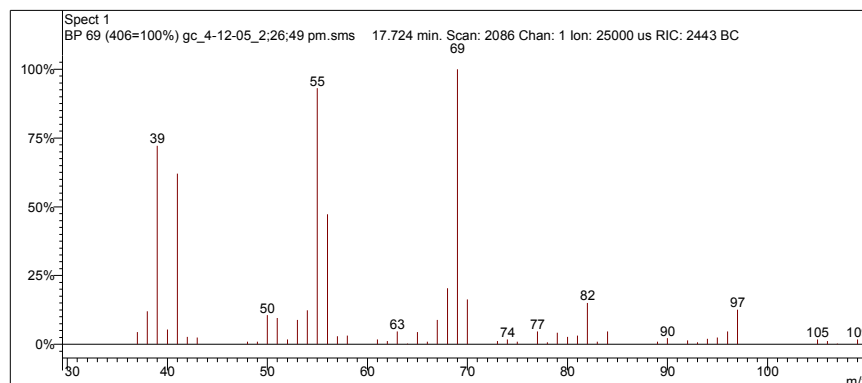
Quantidade desprezível.

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
98	$[M]^{++} = C_7H_{14}^+$	Íon molecular de baixa intensidade não justifica molécula com ressonância. Suspeita de instabilidade devido a pouca quantidade de amostra.
97	$[M - 1]^{++} = C_7H_{13}^+$	Perda de hidrogênio.
83	$[M - 15]^+ = C_6H_{11}^+$	Perda de metila.
69	$C_5H_9^+$	Perda de etila.
55	$C_3H_7^+$	Perda de propila.

(Z)-2-metilhex-3-eno**Amostra de Gasolina Comum**

Scan 2086 from c:\... \doutorado\amostras\cgms\gc_4-12-05_2;26;49 pm.sms



Spectrum from c:\... \amostras\cgms\gc_4-12-05_2;26;49 pm.sms
 Scan No: 2086, Time: 17.724 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 17.724 min. Scan: 2086 Chan: 1 Ion: 25000 us RIC: 2443 BC
 Pair Count: 68 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 150

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Quantidade desprezível.

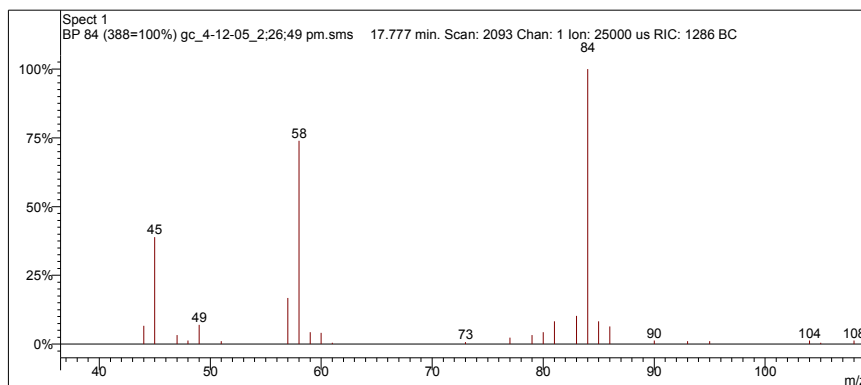
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
98	$[M]^{++} = C_7H_{14}^+$	Íon molecular de baixa intensidade não justifica molécula com ressonância. Suspeita de instabilidade devido a pouca quantidade de amostra.
97	$[M - 1]^{++} = C_7H_{13}^+$	Perda de hidrogênio.
83	$[M - 15]^+ = C_6H_{11}^+$	Perda de metila.
69	$C_5H_9^+$	Perda de etila.
55	$C_3H_7^+$	Perda de propila.

Tiofeno

Amostra de Gasolina Comum

Scan 2093 from c:\... \doutorado\amostras\cgms\gc_4-12-05_2;26;49 pm.sms



Spectrum from c:\... \amostras\cgms\gc_4-12-05_2;26;49 pm.sms
Scan No: 2093, Time: 17.777 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 17.777 min. Scan: 2093 Chan: 1 Ion: 25000 us RIC: 1286 BC
Pair Count: 44 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 150

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Quantidade desprezível.

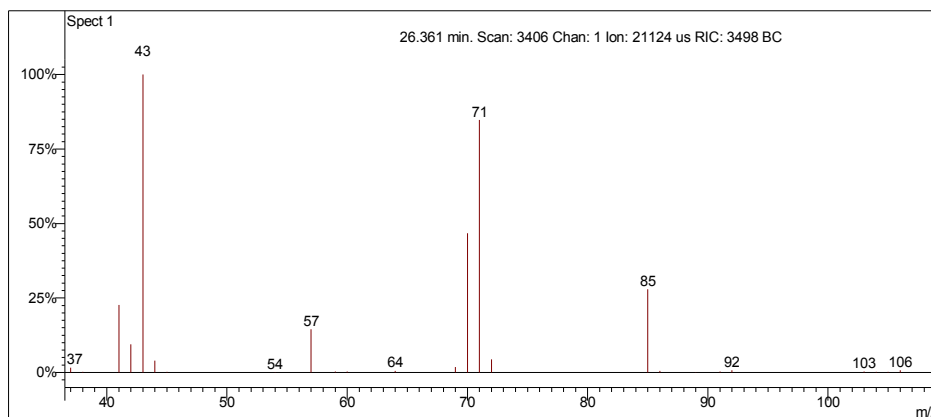
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
84	$[M]^{++} = C_4H_4S^+$	Íon molecular de alta intensidade justifica molécula com ressonância.
58	$[M - 26]^{++} = C_2H_2S^+$	Quebra do anel com perda de acetileno.
45	$[M - 39]^+ = CHS^+$	Perda de C_3H_3 .

3,3-dimetilpentano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 3406 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 3406, Time: 26.361 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 26.361 min. Scan: 3406 Chan: 1 Ion: 21124 us RIC: 3498 BC
Pair Count: 57 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Quantidade desprezível.

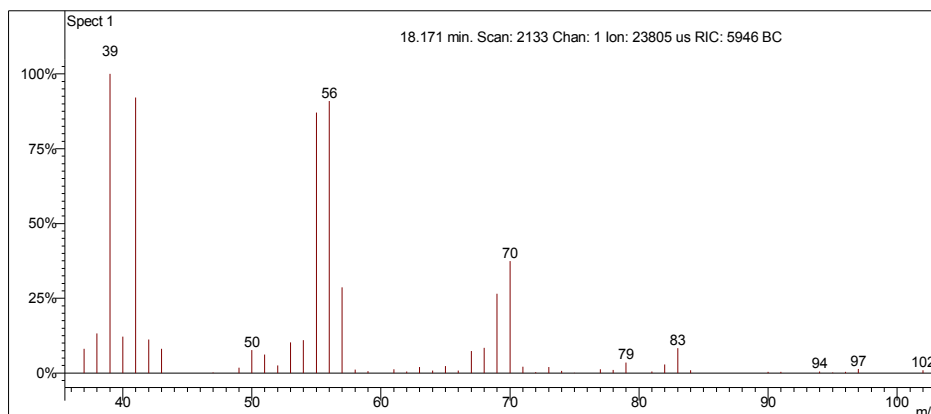
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
100 (ausente)	$[M]^{++} = C_7H_{16}^+$	Baixa intensidade do íon molecular indica molécula linear.
85	$[M - 15]^+ = C_6H_{13}^+$	Perda de metila.
71	$[M - 29]^+ = C_5H_{11}^+$	Fragmentação alílica simples. Perda de etila.
43	$C_3H_7^+$	Fragmentação alílica com rearranjos de hidrogênio.

5-metilex-1-eno

Amostra de Gasolina Comum

Scan 2133 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
 Scan No: 2133, Time: 18.171 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 18.171 min. Scan: 2133 Chan: 1 Ion: 23805 us RIC: 5946 BC
 Pair Count: 66 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 150

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Quantidade desprezível.

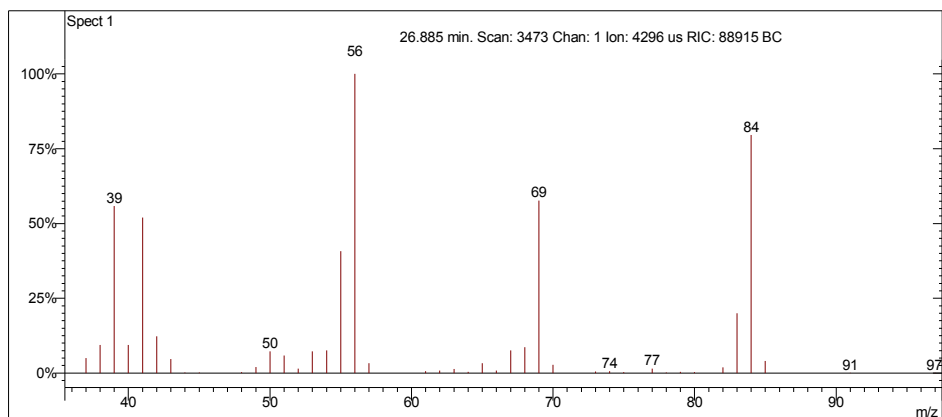
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
98 (ausente)	$[M]^{++} = C_7H_{14}^+$	Baixa intensidade do íon molecular indica molécula linear. Neste caso a dupla ligação no final da molécula não a estabiliza.
83	$[M - 15]^+ = C_6H_{11}^+$	Perda de metila.
70	$C_5H_{10}^+$	Fragmentação no carbono alfa à dupla ligação.
56	$C_4H_8^+$	Fragmentação no carbono beta à dupla ligação.

Cicloexano

Amostra de Gasolina Comum

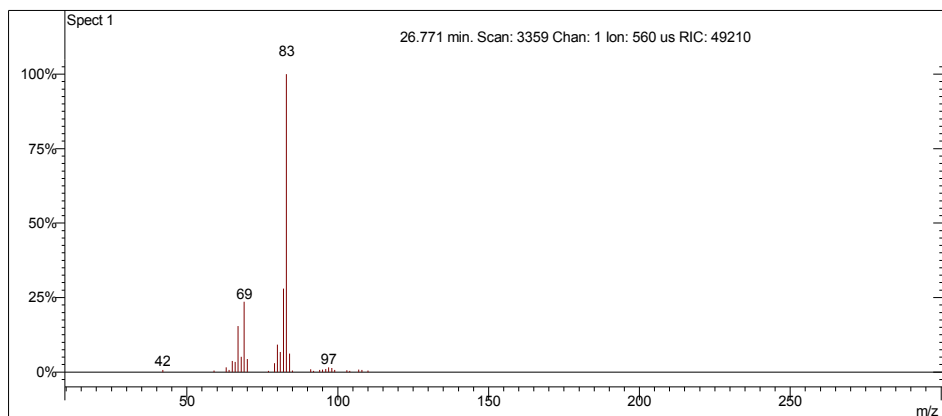
Scan 3473 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 3473, Time: 26.885 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 26.885 min. Scan: 3473 Chan: 1 Ion: 4296 us RIC: 88915 BC
Pair Count: 45 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

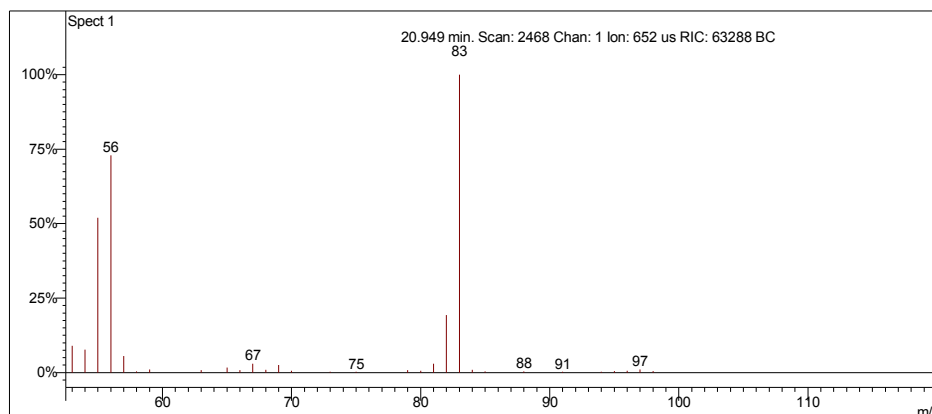
Scan 3359 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 3359, Time: 26.771 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 26.771 min. Scan: 3359 Chan: 1 Ion: 560 us RIC: 49210
Pair Count: 31 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 2468 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 2468, Time: 20.949 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 20.949 min. Scan: 2468 Chan: 1 Ion: 652 us RIC: 63288 BC
 Pair Count: 32 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
84	$[M]^{+} = C_6H_{12}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
69	$[M - 15]^{+} = C_5H_9^{+}$	Fragmentação do anel com perda de metila.
56	$[M - 28]^{+} = C_5H_9^{+}$	Fragmentação do anel com perda de eteno.
41	$C_3H_5^{+}$	Fragmentação do anel com perda de propila.

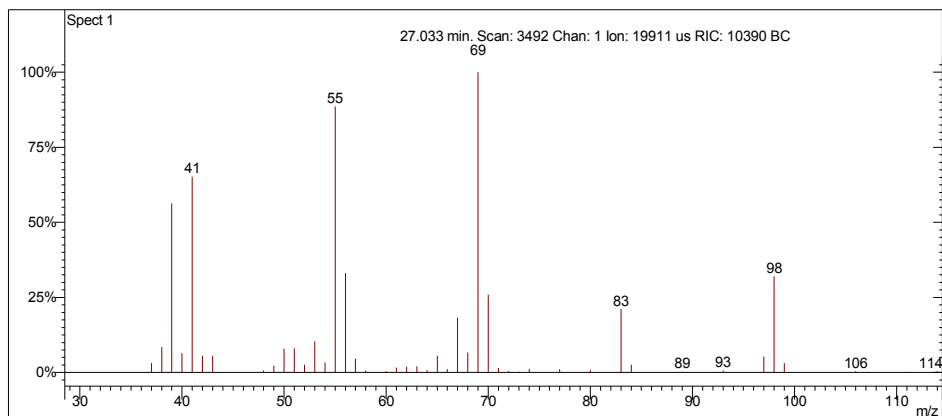
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M - 1]^{+} = 83$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} = CH_2CN^{+} + \cdot H$ $CH_2CN^{+} + C_6H_{12} = C_6H_{11}^{+} + CH_3CN$		
$[M - 1]^{+} = 83$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{+} = CH_2OH^{+} + \cdot H$ $CH_2OH^{+} + C_6H_{12} = C_6H_{11}^{+} + CH_3OH$		

Desconhecido 4

Amostra de Gasolina Comum

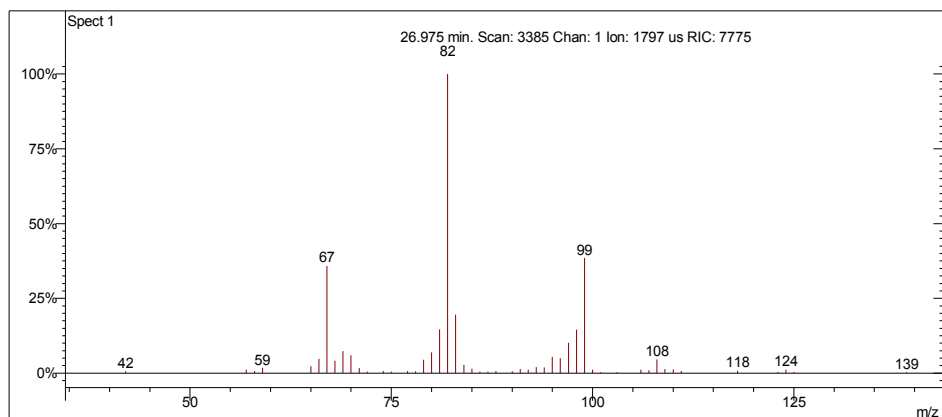
Scan 3492 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 3492, Time: 27.033 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 27.033 min. Scan: 3492 Chan: 1 Ion: 19911 us RIC: 10390 BC
Pair Count: 74 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

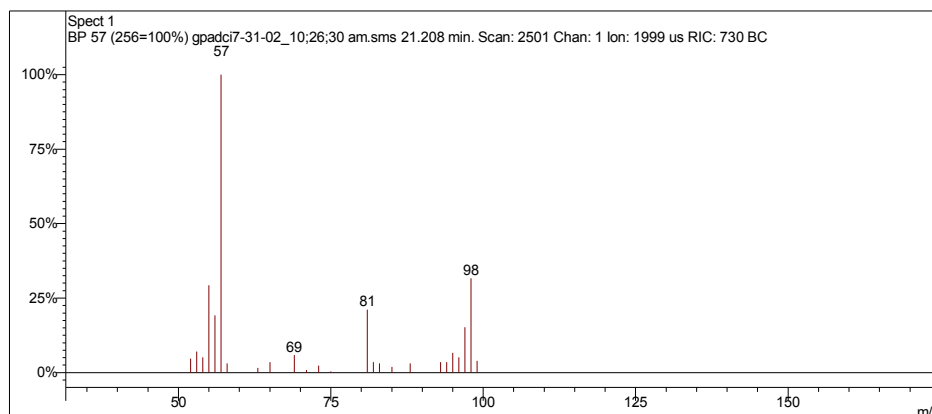
Scan 3385 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 3385, Time: 26.975 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 26.975 min. Scan: 3385 Chan: 1 Ion: 1797 us RIC: 7775
Pair Count: 52 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 2501 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 2501, Time: 21.208 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 21.208 min. Scan: 2501 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 730 BC
Pair Count: 25 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
98	$[M]^{++} = C_7H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância, confirmado por ionização química.
83	$[M - 15]^+ = C_6H_{11}^+$	Perda de metila.
70	$C_5H_{10}^+$	Perda de eteno.
56	$C_4H_8^+$	Perda de C_3H_6 .
Conclusão: a substância pode ser classificada como olefínico com 7 carbonos.		

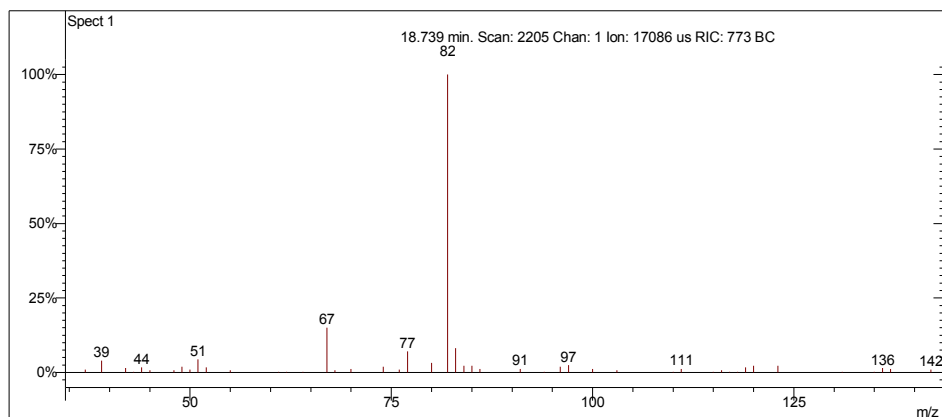
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 99$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^+ + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_7H_{14} = C_7H_{15}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 98$	Transferência de carga.	Metanol
$CH_3OH^+ + C_7H_{14} = C_7H_{14}^{++} + CH_3OH$		

Hexa-2,4-dieno

Amostra de Gasolina Comum

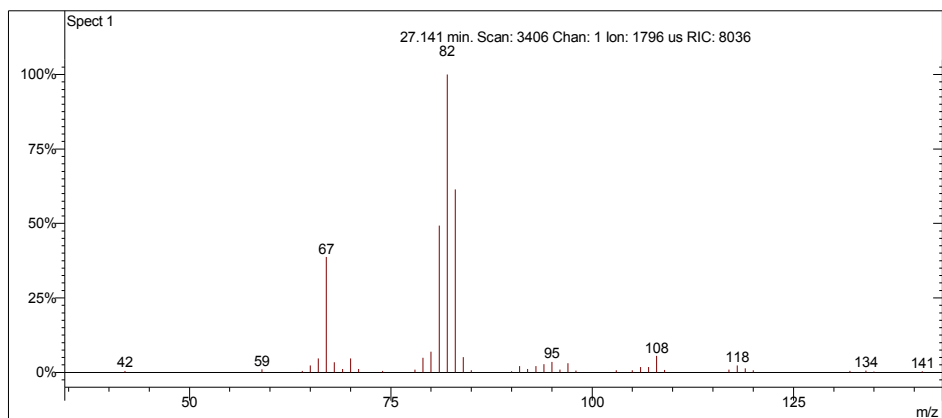
Scan 2205 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 2205, Time: 18.739 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 18.739 min. Scan: 2205 Chan: 1 Ion: 17086 us RIC: 773 BC
Pair Count: 51 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 150

Ionização Química com Acetonitrila

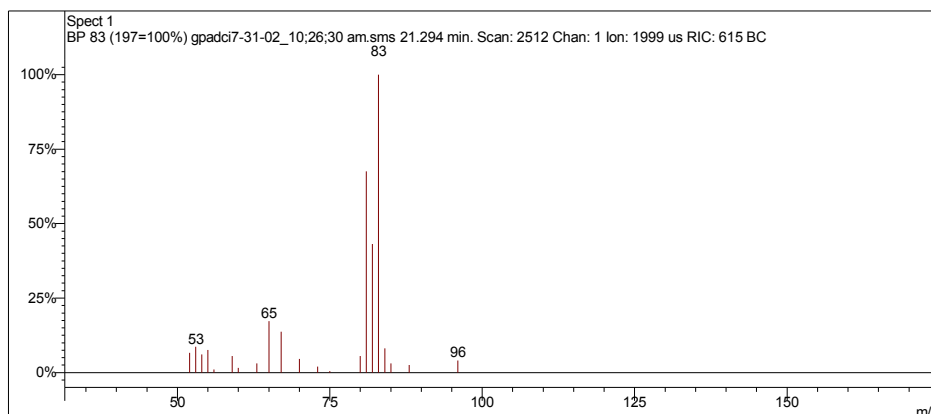
Scan 3406 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciact_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciact_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 3406, Time: 27.141 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 27.141 min. Scan: 3406 Chan: 1 Ion: 1796 us RIC: 8036
Pair Count: 43 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 2512 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 2512, Time: 21.294 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 21.294 min. Scan: 2512 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 615 BC
Pair Count: 21 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
82	$[M]^{++} = C_6H_{10}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
81	$[M - 1]^+ = C_6H_9^+$	Perda de hidrogênio.
67	$[M - 15]^+ = C_5H_7^+$	Perda de metila. Pico base.

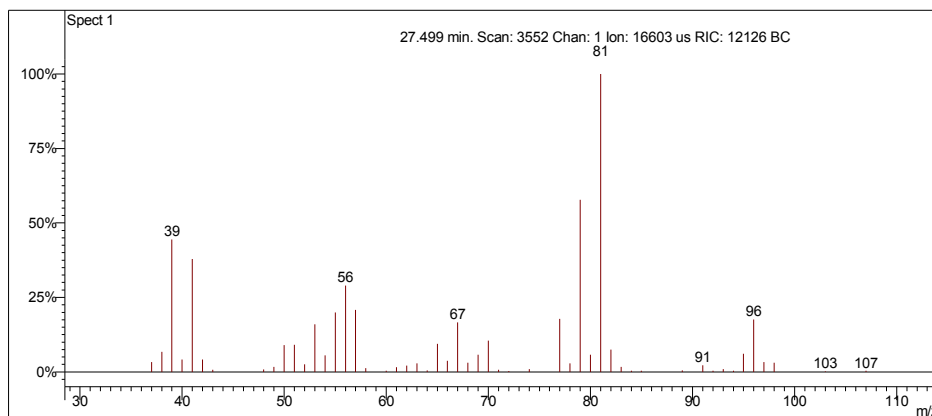
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M]^{++} = 82$	Transferência de carga.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + C_6H_{10} = C_6H_{10}^{++} + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 83$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_6H_{10} = C_6H_{11}^+ + CH_3OH$		

2,3-dimetilpenta-1,3-dieno

Amostra de Gasolina Comum

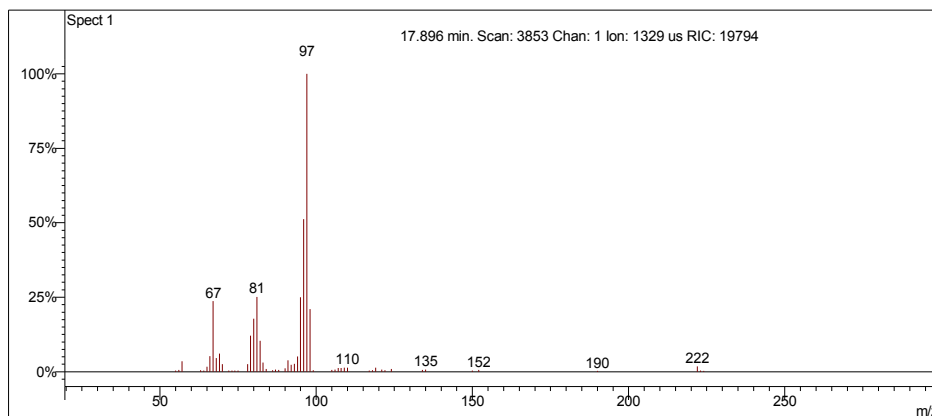
Scan 3552 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 3552, Time: 27.499 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 27.499 min. Scan: 3552 Chan: 1 Ion: 16603 us RIC: 12126 BC
Pair Count: 68 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

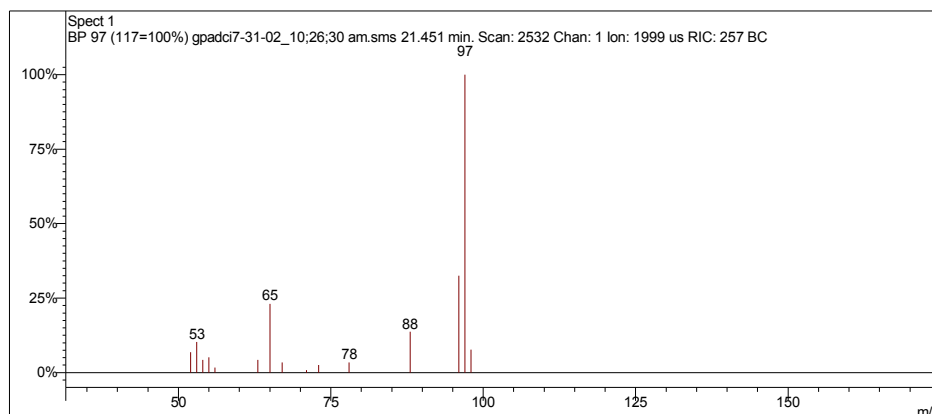
Scan 3853 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms
Scan No: 3853, Time: 17.896 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 17.896 min. Scan: 3853 Chan: 1 Ion: 1329 us RIC: 19794
Pair Count: 55 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 2532 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 2532, Time: 21.451 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 21.451 min. Scan: 2532 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 257 BC
Pair Count: 15 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
96	$[M]^+ = C_7H_{12}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
81	$[M - 15]^+ = C_6H_9^+$	Perda de metila. Pico base.
67	$C_5H_7^+$	Perda de etila.

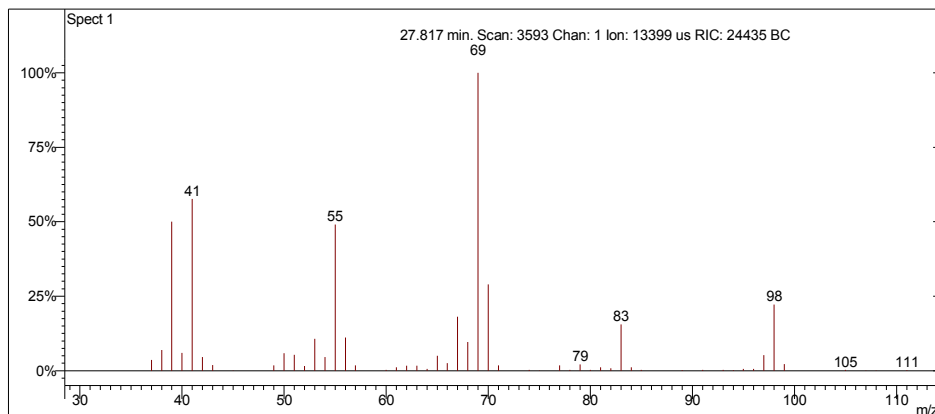
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 97$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_7H_{12} = C_7H_{13}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 97$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_7H_{12} = C_7H_{13}^+ + CH_3OH$		

4-metilex-2-eno

Amostra de Gasolina Comum

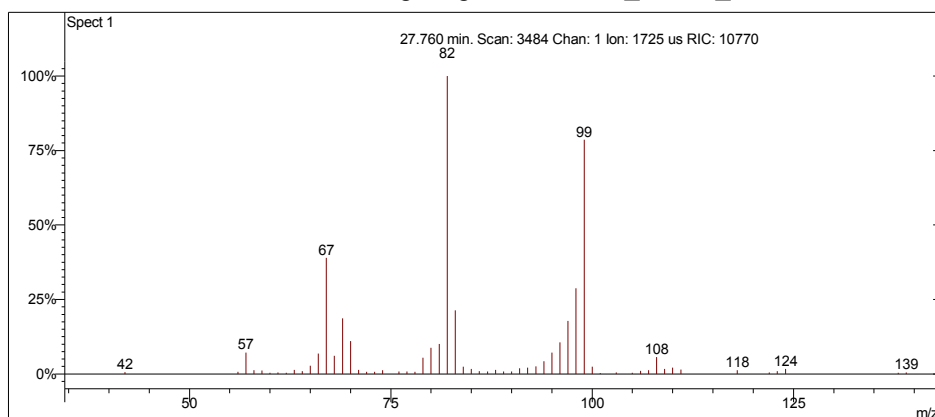
Scan 3593 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 3593, Time: 27.817 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 27.817 min. Scan: 3593 Chan: 1 Ion: 13399 us RIC: 24435 BC
Pair Count: 62 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

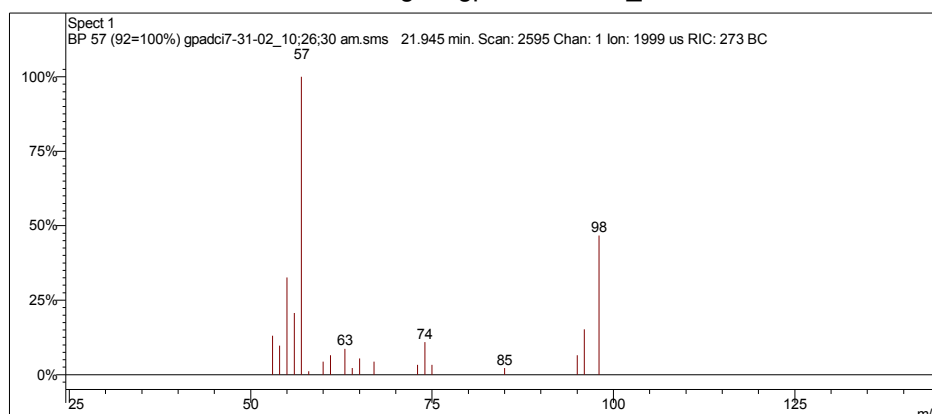
Scan 3484 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 3484, Time: 27.760 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 27.760 min. Scan: 3484 Chan: 1 Ion: 1725 us RIC: 10770
Pair Count: 62 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 2595 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 2595, Time: 21.945 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 21.945 min. Scan: 2595 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 273 BC
Pair Count: 19 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
98	$[M]^{+} = C_7H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância, confirmado por ionização química.
83	$[M - 15]^{+} = C_6H_{11}^{+}$	Perda de metila.
69	$C_5H_9^{+}$	Perda de etila.
55	$C_4H_7^{+}$	Perda de propila.
41	$C_3H_5^{+}$	Fragmentação no carbono alfa à dupla ligação.

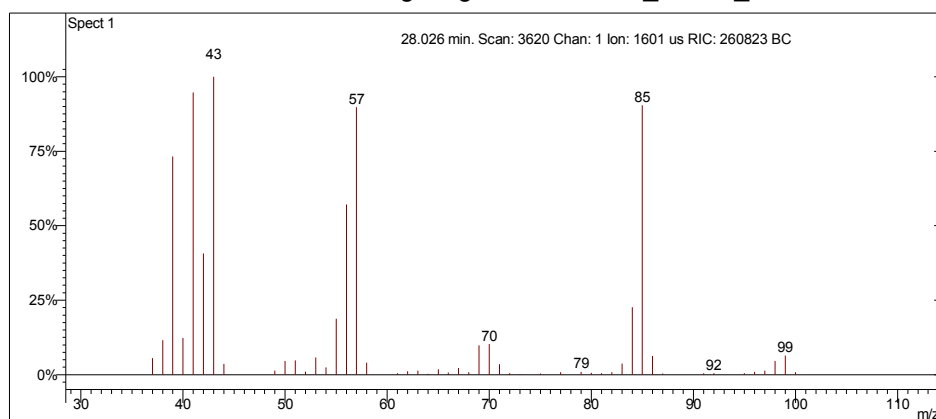
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 99$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_7H_{14} = C_7H_{15}^{+} + CH_3CN$		
$[M]^{+} = 98$	Transferência de carga.	Metanol
$CH_3OH_2^{+} + C_7H_{14} = C_7H_{14}^{+} + CH_3OH$		

2-metilexano

Amostra de Gasolina Comum

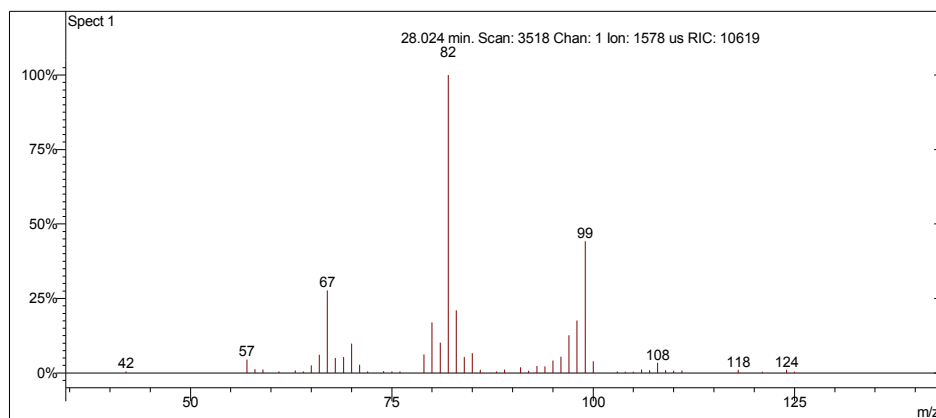
Scan 3620 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 3620, Time: 28.026 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 28.026 min. Scan: 3620 Chan: 1 Ion: 1601 us RIC: 260823 BC
Pair Count: 50 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 3518 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 3518, Time: 28.024 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 28.024 min. Scan: 3518 Chan: 1 Ion: 1578 us RIC: 10619
Pair Count: 51 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
100	$[M]^{+} = C_7H_{16}^{+}$	Baixa intensidade do íon molecular indica molécula linear.
85	$[M - 15]^{+} = C_6H_{13}^{+}$	Perda de metila.
57	$C_4H_9^{+}$	Perda de propila.
43	$C_3H_7^{+}$	Fragmentação alílica com perda de isobutila.
41	$C_3H_5^{+}$	Fragmentação alílica com perda de isobutila, acompanhado de rearranjos de hidrogênio para formação do carbocátion.
39	$C_3H_3^{+}$	Fragmentação alílica com perda de isobutila, acompanhado de rearranjos de hidrogênio para formação do carbocátion.

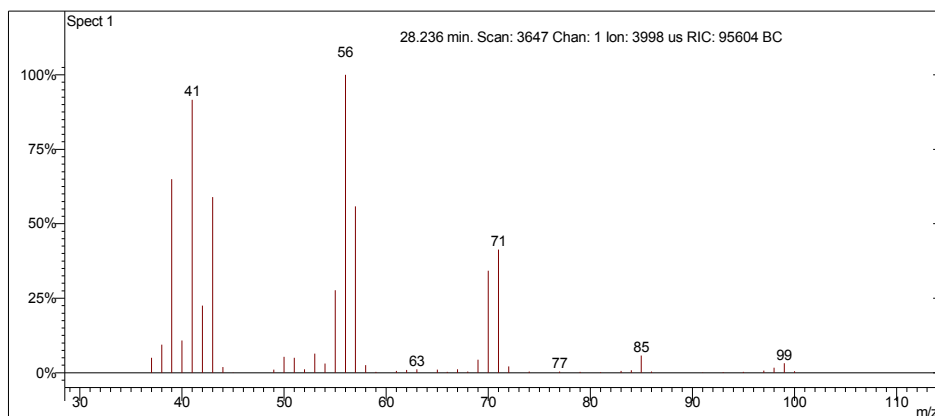
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M - 1]^{+} = 99$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} = CH_2CN^{+} + \cdot H$ $CH_2CN^{+} + C_7H_{16} = C_7H_{15}^{+} + CH_3CN$		
sem sinal		Metanol
Ionização química instável.		

2,3-dimetilpentano

Amostra de Gasolina Comum

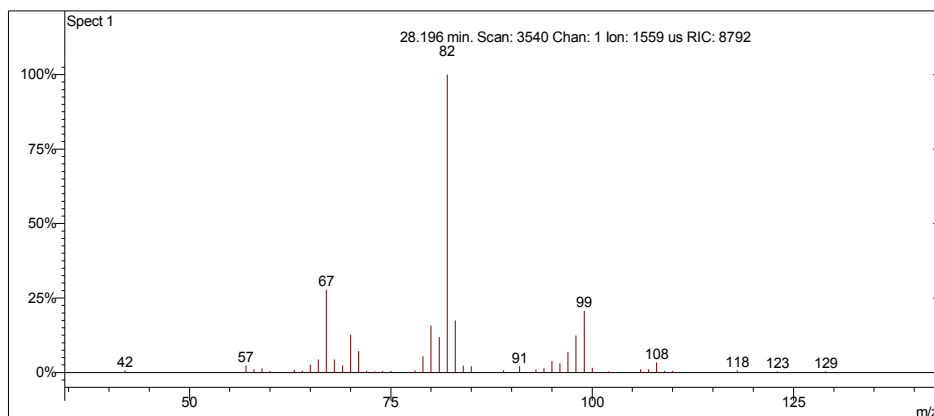
Scan 3647 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 3647, Time: 28.236 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 28.236 min. Scan: 3647 Chan: 1 Ion: 3998 us RIC: 95604 BC
Pair Count: 48 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 3540 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 3540, Time: 28.196 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 28.196 min. Scan: 3540 Chan: 1 Ion: 1559 us RIC: 8792
Pair Count: 46 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
100 (ausente)	$[M]^{++} = C_7H_{16}^+$	Baixa intensidade do íon molecular indica molécula linear.
85	$[M - 15]^+ = C_6H_{13}^+$	Perda de metila.
57	$C_4H_9^+$	Fragmentação alílica com perda de propila.
43	$C_3H_7^+$	Fragmentação alílica com perda de C_4H_9 .
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação alílica com perda de isobutila com rearranjos de hidrogênio.
39	$C_3H_3^+$	Fragmentação alílica com perda de isobutila, acompanhado de rearranjos de hidrogênio para formação do carbocátion.

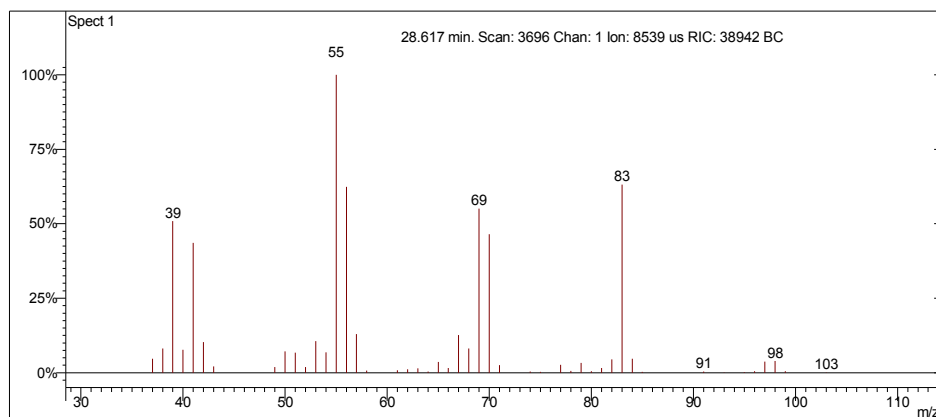
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M - 1]^+ = 99$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_7H_{16} = C_7H_{15}^+ + CH_3CN$		
sem sinal		Metanol
Ionização química instável.		

1,1-dimetilciclopentano

Amostra de Gasolina Comum

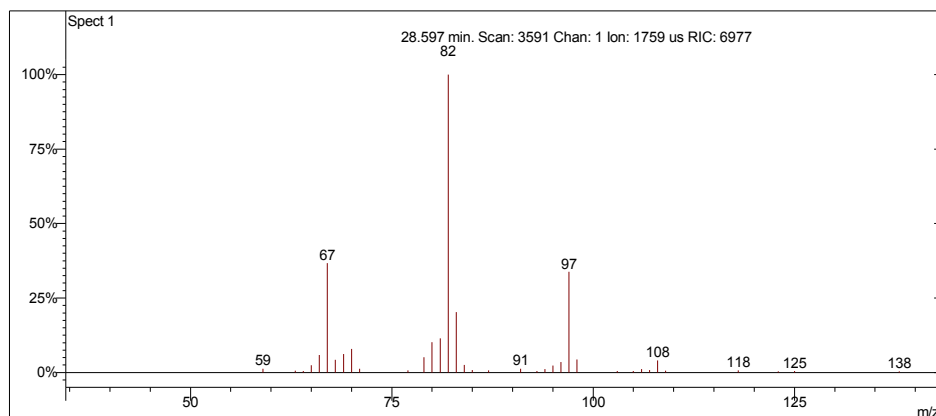
Scan 3696 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 3696, Time: 28.617 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 28.617 min. Scan: 3696 Chan: 1 Ion: 8539 us RIC: 38942 BC
Pair Count: 52 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

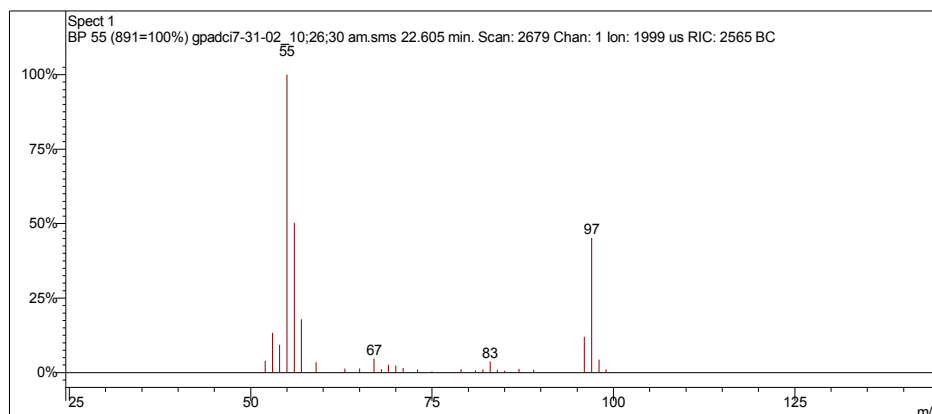
Scan 3591 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 3591, Time: 28.597 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 28.597 min. Scan: 3591 Chan: 1 Ion: 1759 us RIC: 6977
Pair Count: 37 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 2679 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 2679, Time: 22.605 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 22.605 min. Scan: 2679 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 2565 BC
Pair Count: 31 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
98	$[M]^{++} = C_7H_{14}^+$	Íon molecular deveria ser maior por ser um naftênico. Ramificações podem explicar baixa abundância.
83	$[M - 15]^+ = C_6H_{11}^+$	Perda de metila.
69	$C_5H_9^+$	Perda de etila.
55	$C_4H_7^+$	Fragmentação no anel, com perda de propila.
41	$C_3H_5^+$	Rearranjos de hidrogênio.

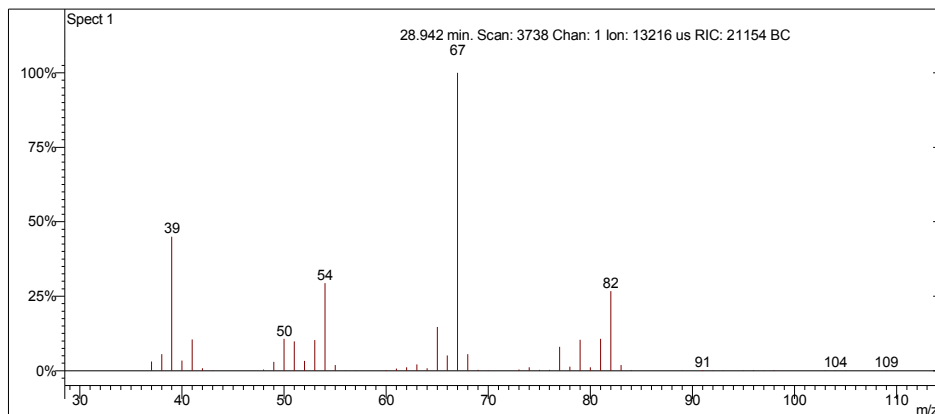
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M - 1]^+ = 97$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_7H_{14} = C_7H_{13}^+ + CH_3CN$		
$[M - 1]^+ = 97$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{++} = CH_2OH^+ + \cdot H$ $CH_2OH^+ + C_7H_{14} = C_7H_{13}^+ + CH_3OH$		

Cicloexeno

Amostra de Gasolina Comum

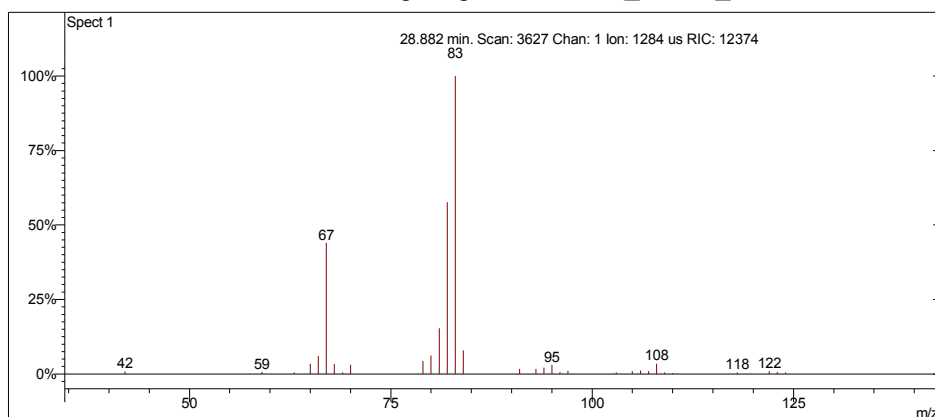
Scan 3738 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 3738, Time: 28.942 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 28.942 min. Scan: 3738 Chan: 1 Ion: 13216 us RIC: 21154 BC
Pair Count: 67 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

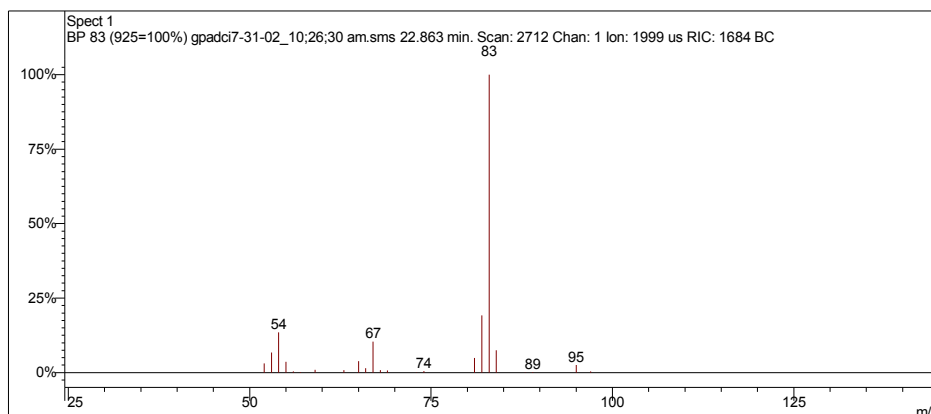
Scan 3627 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 3627, Time: 28.882 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 28.882 min. Scan: 3627 Chan: 1 Ion: 1284 us RIC: 12374
Pair Count: 32 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 2712 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 2712, Time: 22.863 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 22.863 min. Scan: 2712 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1684 BC
 Pair Count: 23 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
82	$[M]^+ = C_6H_{10}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
67	$[M - 15]^+ = C_5H_7^+$	Perda de metila. Pico base.
54	$[M - 28]^+ = C_4H_5^+$	Fragmentação do anel com perda de eteno.

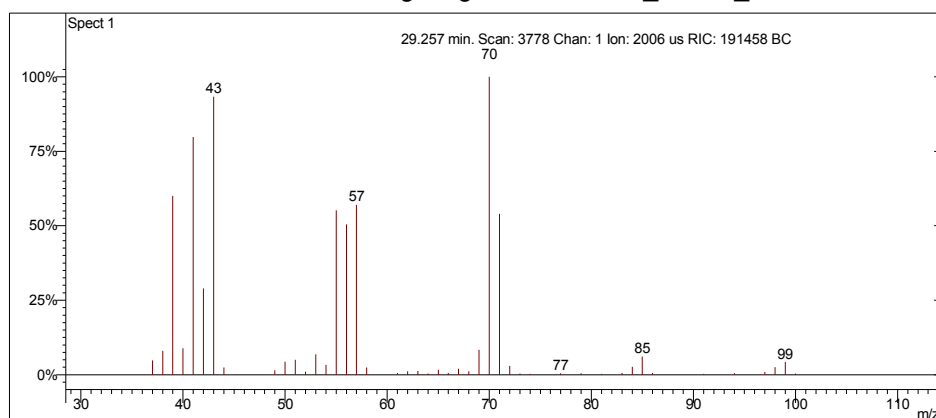
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 83$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^+ + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_6H_{10} = C_7H_{11}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 83$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^+ + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_6H_{10} = C_7H_{11}^+ + CH_3OH$		

3-metilexano

Amostra de Gasolina Comum

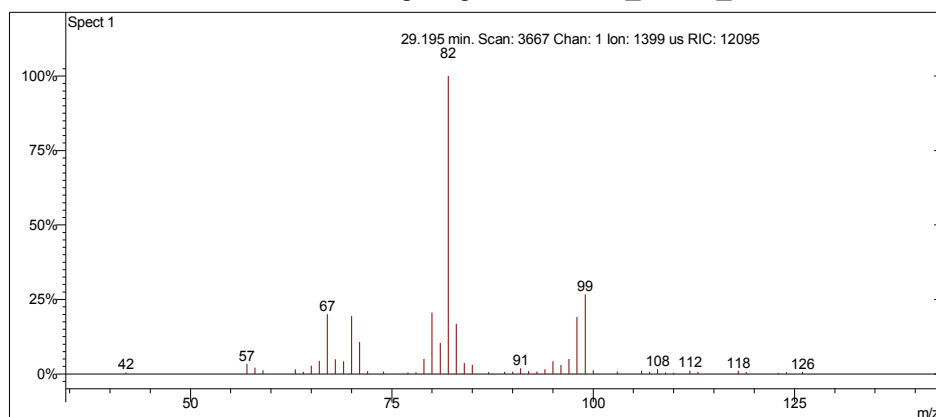
Scan 3778 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 3778, Time: 29.257 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 29.257 min. Scan: 3778 Chan: 1 Ion: 2006 us RIC: 191458 BC
Pair Count: 46 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 3667 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 3667, Time: 29.195 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 29.195 min. Scan: 3667 Chan: 1 Ion: 1399 us RIC: 12095
Pair Count: 50 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
100 (ausente)	$[M]^{++} = C_7H_{16}^+$	Baixa intensidade do íon molecular indica molécula linear.
85	$[M - 15]^+ = C_6H_{13}^+$	Perda de metila.
71	$[M - 29]^+ = C_5H_{10}^+$	Perda de etano.
70	$[M - 30]^+ = C_5H_9^+$	Perda de etano com rearranjo.
57	$C_4H_9^+$	Fragmentação alílica com perda de propila.
43	$C_3H_7^+$	Fragmentação alílica com perda de isobutila, acompanhado de rearranjos de hidrogênio para formação do carbocátion.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação alílica com perda de C_4H_{11} .
39	$C_3H_3^+$	Rearranjos de hidrogênio para formação do carbocátion.

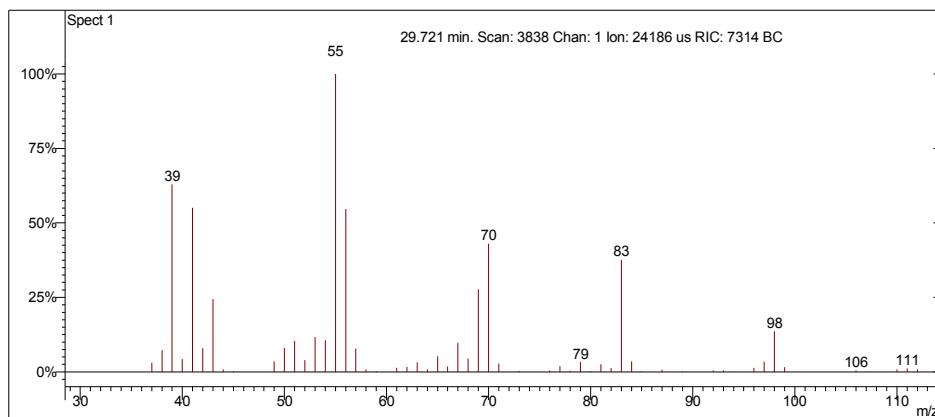
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M - 1]^+ = 99$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_7H_{16} = C_7H_{15}^+ + CH_3CN$		
sem sinal	Abstração de hidreto.	Metanol
Ionização química instável.		

(Z)-1,2-dimetilciclopentano

Amostra de Gasolina Comum

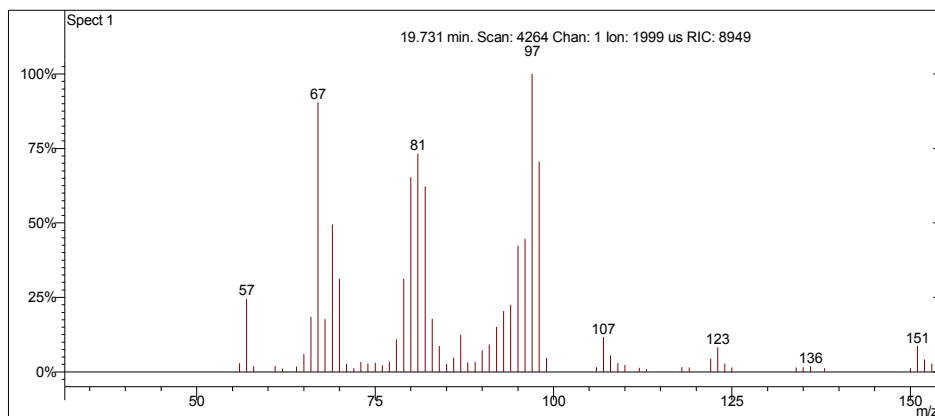
Scan 3838 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 3838, Time: 29.721 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 29.721 min. Scan: 3838 Chan: 1 Ion: 24186 us RIC: 7314 BC
Pair Count: 80 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

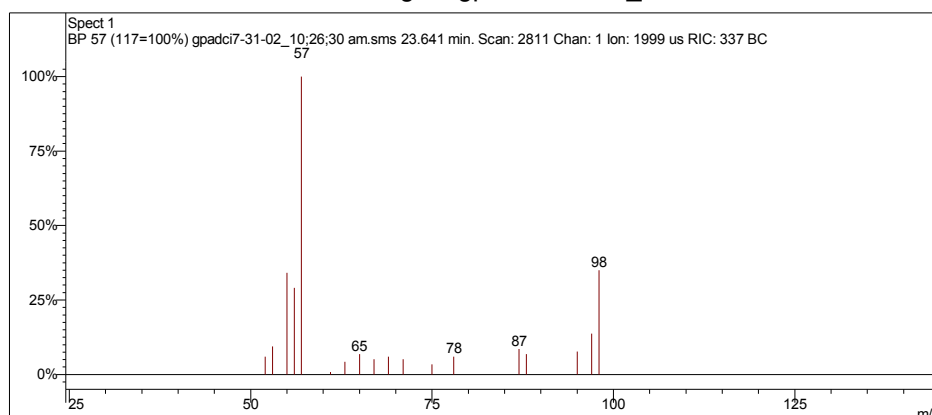
Scan 4264 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms
Scan No: 4264, Time: 19.731 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 19.731 min. Scan: 4264 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 8949
Pair Count: 71 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 2811 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 2811, Time: 23.641 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 23.641 min. Scan: 2811 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 337 BC
Pair Count: 18 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
98	$[M]^{++} = C_7H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância, confirmado por ionização química.
83	$[M - 15]^+ = C_6H_{11}^+$	Perda de metila.
70	$[M - 28]^+ = C_5H_{10}^+$	Perda de eteno.
55	$C_4H_7^+$	Fragmentação no anel com perda de propila.
41	$C_3H_5^+$	Rearranjos de hidrogênio.

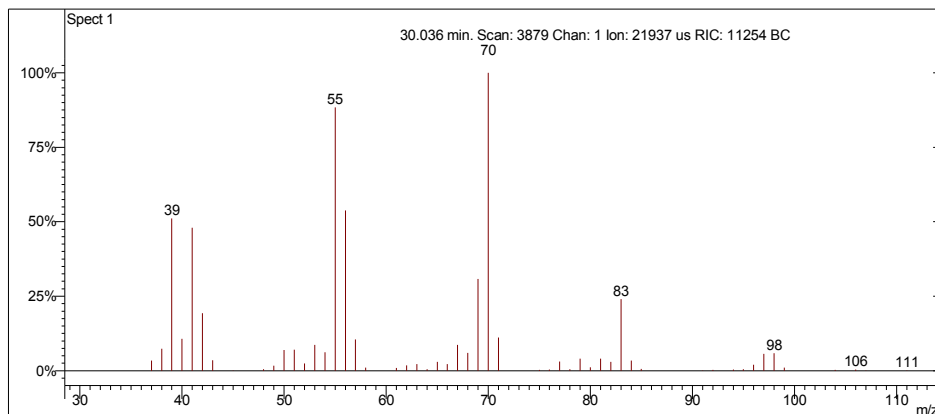
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M - 1]^+ = 97$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_7H_{14} = C_7H_{13}^+ + CH_3CN$		
$[M - 1]^+ = 98$	Transferência de carga	Metanol
$CH_3OH_2^+ + C_7H_{14} = C_7H_{14}^+ + CH_3OH$		

(Z)-1,3-dimetilciclopentano

Amostra de Gasolina Comum

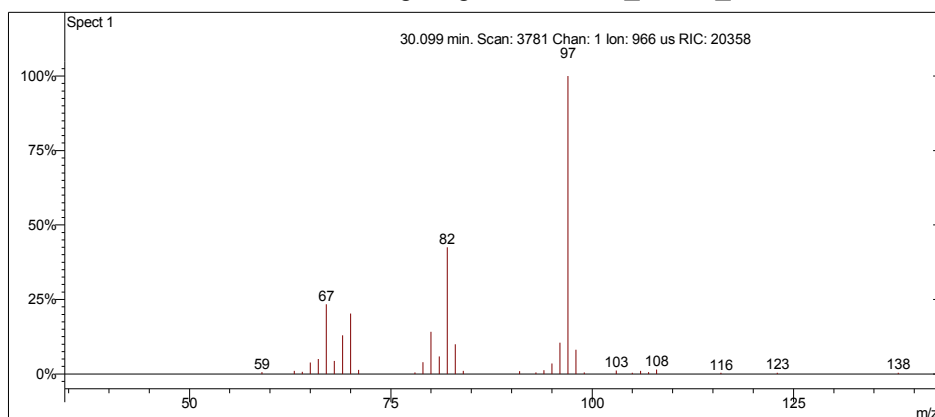
Scan 3879 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 3879, Time: 30.036 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 30.036 min. Scan: 3879 Chan: 1 Ion: 21937 us RIC: 11254 BC
Pair Count: 78 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

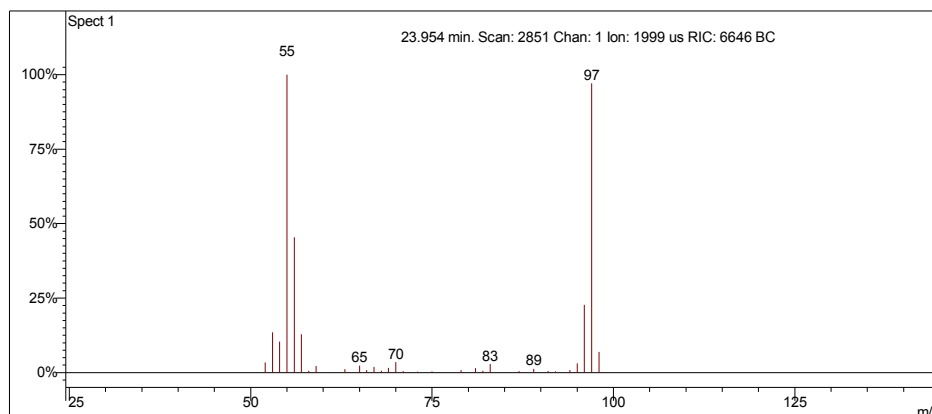
Scan 3781 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 3781, Time: 30.099 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 30.099 min. Scan: 3781 Chan: 1 Ion: 966 us RIC: 20358
Pair Count: 33 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 2851 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 2851, Time: 23.954 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 23.954 min. Scan: 2851 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 6646 BC
 Pair Count: 33 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
98	$[M]^{++} = C_7H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
83	$[M - 15]^+ = C_6H_{11}^+$	Perda de metila.
70	$[M - 28]^+ = C_5H_{10}^+$	Perda de eteno.
55	$C_4H_7^+$	Fragmentação no anel com perda de propila.
41	$C_3H_5^+$	Rearranjos de hidrogênio para formação do carbocátion.

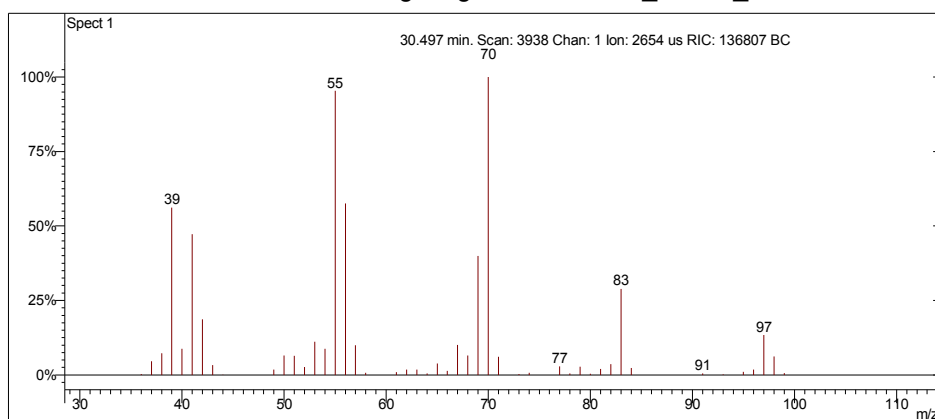
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M - 1]^+ = 97$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_7H_{14} = C_7H_{13}^+ + CH_3CN$		
$[M - 1]^+ = 97$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{++} = CH_2OH^+ + \cdot H$ $CH_2OH^+ + C_7H_{14} = C_7H_{13}^+ + CH_3OH$		

(E)-1,3-dimetilciclopentano

Amostra de Gasolina Comum

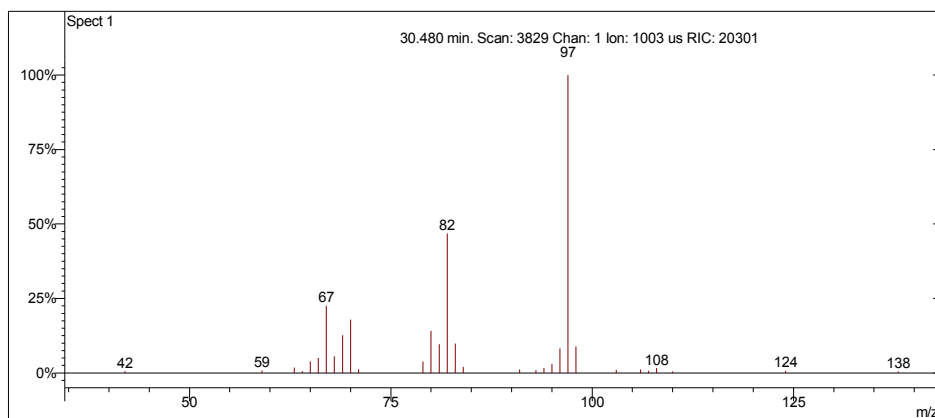
Scan 3938 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 3938, Time: 30.497 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 30.497 min. Scan: 3938 Chan: 1 Ion: 2654 us RIC: 136807 BC
Pair Count: 49 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

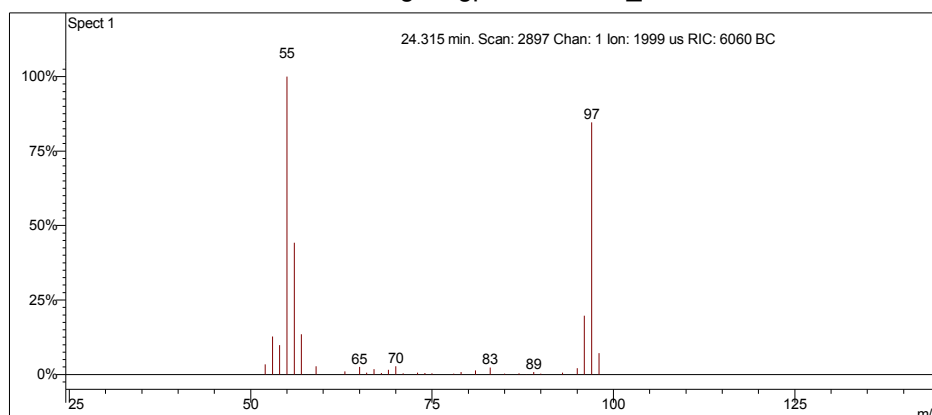
Scan 3829 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 3829, Time: 30.480 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 30.480 min. Scan: 3829 Chan: 1 Ion: 1003 us RIC: 20301
Pair Count: 31 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 2897 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 2897, Time: 24.315 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 24.315 min. Scan: 2897 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 6060 BC
 Pair Count: 33 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
98	$[M]^+ = C_7H_{14}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula com ramificações.
97	$[M - 1]^+ = C_7H_{13}^+$	Perda de hidrogênio.
83	$[M - 15]^+ = C_6H_{11}^+$	Perda de metila.
70	$[M - 28]^+ = C_5H_{10}^+$	Perda de eteno.
55	$C_4H_7^+$	Fragmentação no anel com perda de propila.
41	$C_3H_5^+$	Rearranjos de hidrogênio.

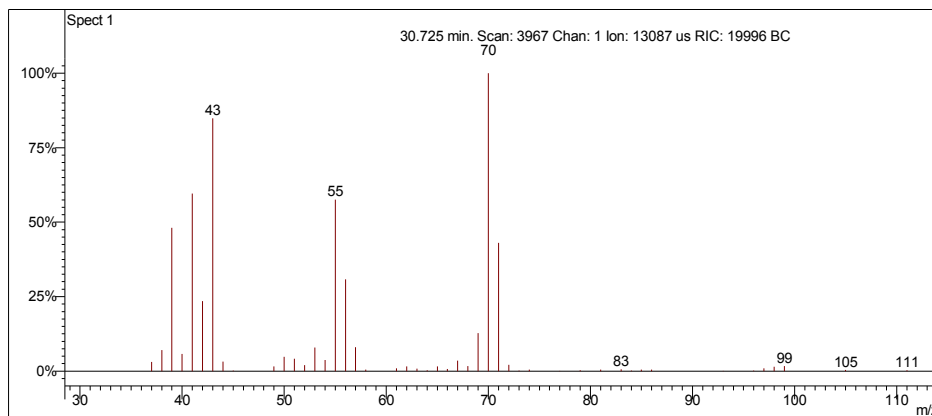
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M - 1]^+ = 97$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_7H_{14} = C_7H_{13}^+ + CH_3CN$		
$[M - 1]^+ = 97$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{++} = CH_2OH^+ + \cdot H$ $CH_2OH^+ + C_7H_{14} = C_7H_{13}^+ + CH_3OH$		

3-etilpentano

Amostra de Gasolina Comum

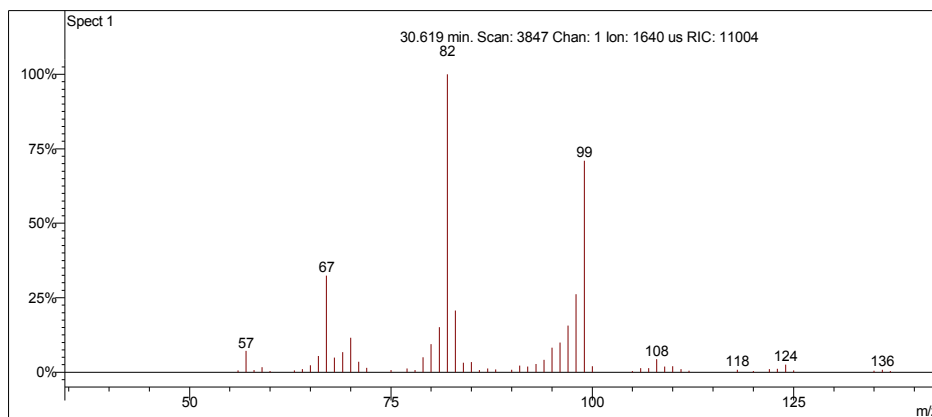
Scan 3967 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 3967, Time: 30.725 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 30.725 min. Scan: 3967 Chan: 1 Ion: 13087 us RIC: 19996 BC
Pair Count: 64 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 3847 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 3847, Time: 30.619 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 30.619 min. Scan: 3847 Chan: 1 Ion: 1640 us RIC: 11004
Pair Count: 59 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
100 (ausente)	$[M]^{+*} = C_7H_{16}^+$	Baixa intensidade do íon molecular indica molécula linear.
71	$[M - 29]^+ = C_5H_{10}^+$	Perda de etila.
70	$[M - 30]^+ = C_5H_9^+$	Perda de etano.
55	$C_4H_7^+$	Perda de propila.
43	$C_3H_7^+$	Fragmentação alílica acompanhada de rearranjos de hidrogênio para formação do carbocátion.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação alílica acompanhada de rearranjos de hidrogênio para formação do carbocátion.

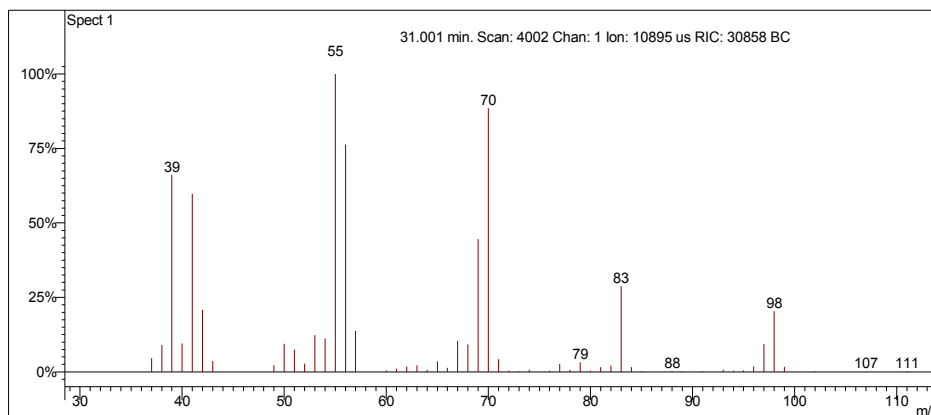
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M - 1]^+ = 99$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+*} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_7H_{16} = C_7H_{15}^+ + CH_3CN$		
sem sinal		Metanol
Ionização química instável.		

(E)-1,2-dimetilciclopentano

Amostra de Gasolina Comum

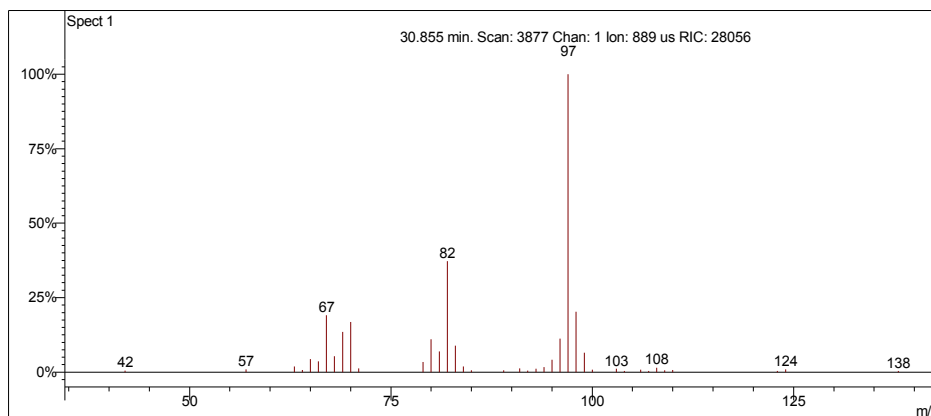
Scan 4002 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 4002, Time: 31.001 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 31.001 min. Scan: 4002 Chan: 1 Ion: 10895 us RIC: 30858 BC
Pair Count: 63 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

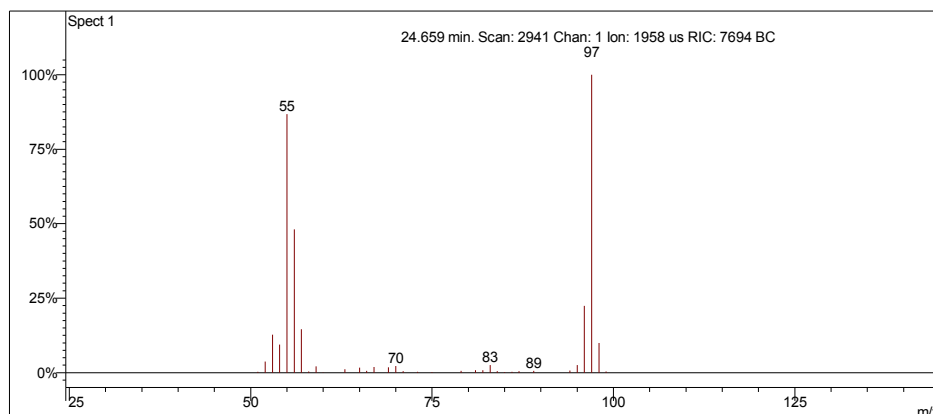
Scan 3877 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciact_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciact_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 3877, Time: 30.855 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 30.855 min. Scan: 3877 Chan: 1 Ion: 889 us RIC: 28056
Pair Count: 39 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 2941 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 2941, Time: 24.659 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 24.659 min. Scan: 2941 Chan: 1 Ion: 1958 us RIC: 7694 BC
 Pair Count: 34 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
98	$[M]^{++} = C_7H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
83	$[M - 15]^+ = C_6H_{11}^+$	Perda de metila.
70	$[M - 28]^+ = C_5H_{10}^+$	Perda de eteno.
55	$C_4H_7^+$	Fragmentação no anel com perda de propila.
41	$C_3H_5^+$	Rearranjos de hidrogênio.

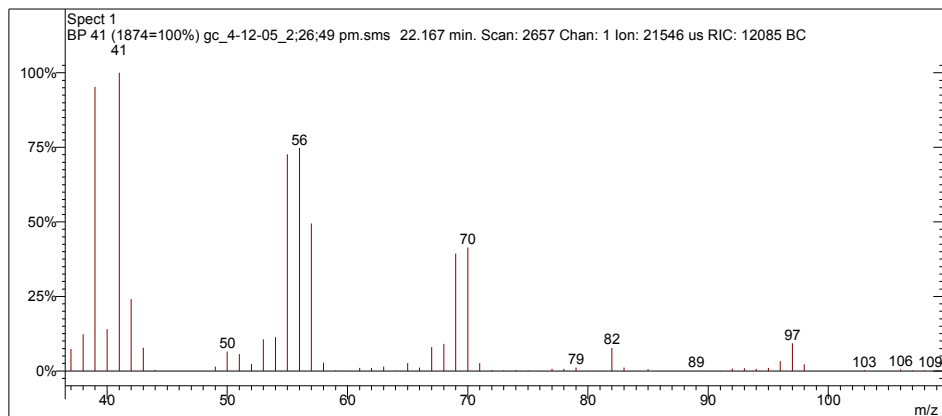
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M - 1]^+ = 97$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_7H_{14} = C_7H_{13}^+ + CH_3CN$		
$[M - 1]^+ = 97$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{++} = CH_2OH^+ + \cdot H$ $CH_2OH^+ + C_7H_{14} = C_7H_{13}^+ + CH_3OH$		

Hept-1-eno

Amostra de Gasolina Comum

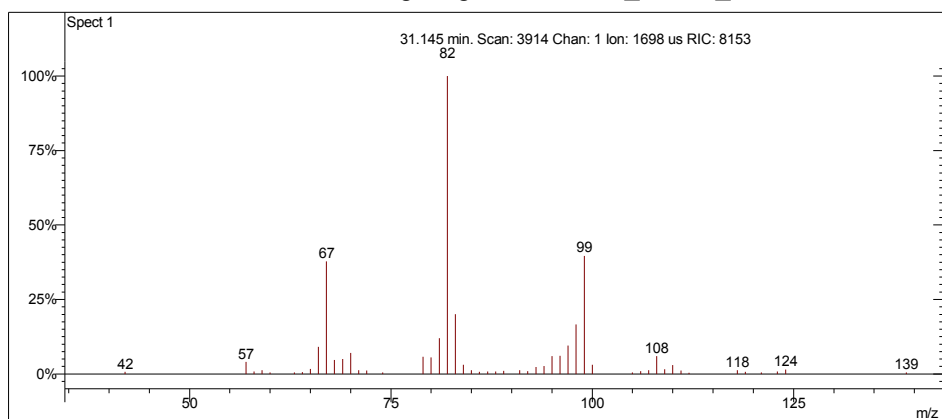
Scan 2657 from c:\... \doutorado\amostras\cgms\gc_4-12-05_2;26;49 pm.sms



Spectrum from c:\... \amostras\cgms\gc_4-12-05_2;26;49 pm.sms
Scan No: 2657, Time: 22.167 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 22.167 min. Scan: 2657 Chan: 1 Ion: 21546 us RIC: 12085 BC
Pair Count: 74 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 150

Ionização Química com Acetonitrila

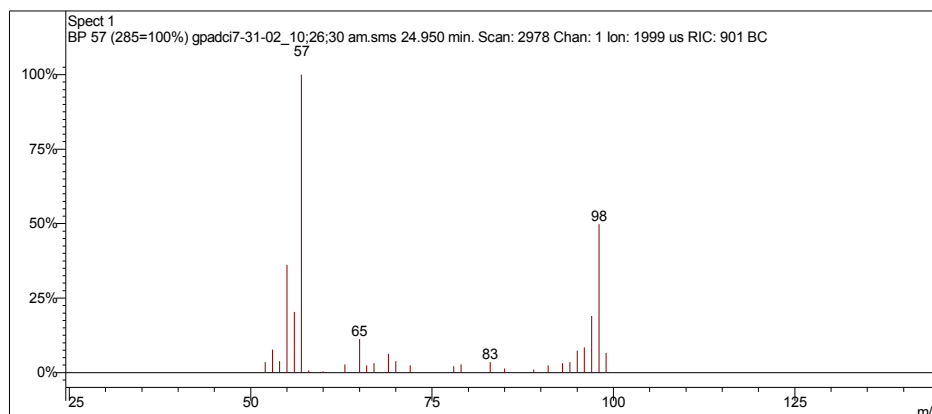
Scan 3914 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 3914, Time: 31.145 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 31.145 min. Scan: 3914 Chan: 1 Ion: 1698 us RIC: 8153
Pair Count: 54 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 2978 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 2978, Time: 24.950 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 24.950 min. Scan: 2978 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 901 BC
Pair Count: 28 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
98 (instável)	$[M]^{+} = C_7H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
83	$[M - 15]^{+} = C_6H_{11}^{+}$	Perda de metila.
70	$[M - 28]^{+} = C_5H_{10}^{+}$	Perda de eteno.
55	$C_4H_7^{+}$	Perda de propila.
41	$C_3H_5^{+}$	Rearranjos de hidrogênio.

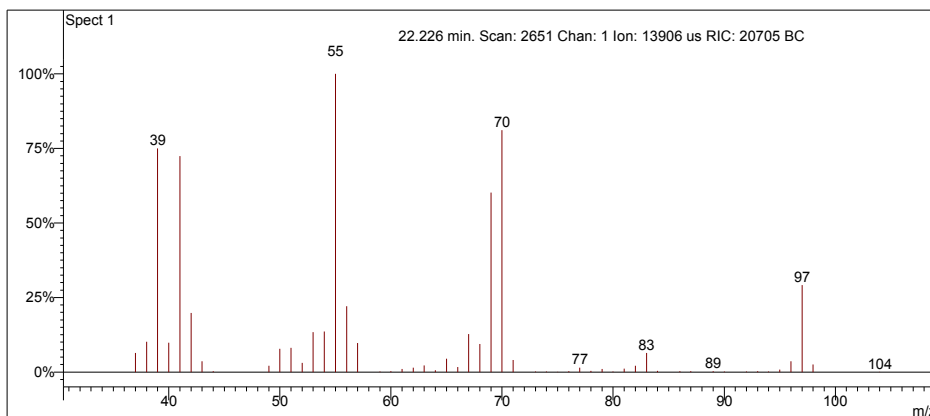
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 99$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_7H_{14} = C_7H_{15}^{+} + CH_3CN$		
$[M]^{+} = 98$	Transferência de carga.	Metanol
$CH_3OH^{+} + C_7H_{14} = C_7H_{14}^{+} + CH_3OH$		

Desconhecido 5

Amostra de Gasolina Comum

Scan 2651 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 2651, Time: 22.226 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 22.226 min. Scan: 2651 Chan: 1 Ion: 13906 us RIC: 20705 BC
Pair Count: 77 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 150

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

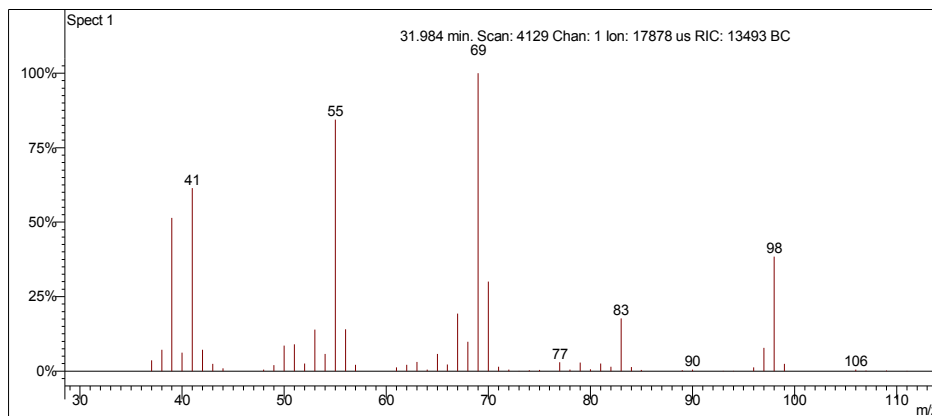
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
98 (ausente)	$[M]^{+} = C_7H_{14}^{+}$	Instabilidade do íon molecular devido a pequena quantidade de amostra.
83	$[M - 15]^{+} = C_6H_{11}^{+}$	Perda de metila.
70	$[M - 28]^{+} = C_5H_{10}^{+}$	Perda de eteno.
55	$C_4H_7^{+}$	Perda de propila .
41	$C_3H_5^{+}$	Rearranjos de hidrogênio.
Conclusão: a substância pode ser considerada como olefínico com 7 carbonos.		

3-metilex-2-eno

Amostra de Gasolina Comum

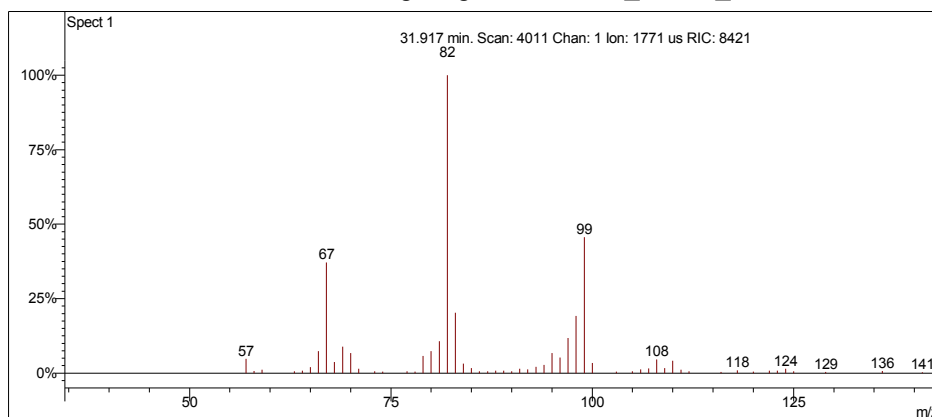
Scan 4129 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 4129, Time: 31.984 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 31.984 min. Scan: 4129 Chan: 1 Ion: 17878 us RIC: 13493 BC
Pair Count: 72 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

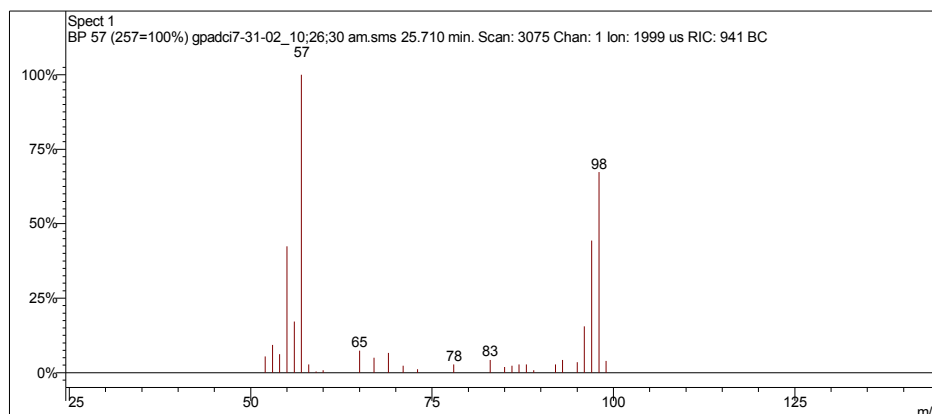
Scan 4011 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 4011, Time: 31.917 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 31.917 min. Scan: 4011 Chan: 1 Ion: 1771 us RIC: 8421
Pair Count: 58 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 3075 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 3075, Time: 25.710 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 25.710 min. Scan: 3075 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 941 BC
Pair Count: 28 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
98	$[M]^{+} = C_7H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
83	$[M - 15]^{+} = C_6H_{11}^{+}$	Perda de metila.
69	$[M - 29]^{+} = C_5H_{10}^{+}$	Perda de etila.
55	$C_4H_7^{+}$	Perda de propila .
41	$C_3H_5^{+}$	Rearranjos de hidrogênio.

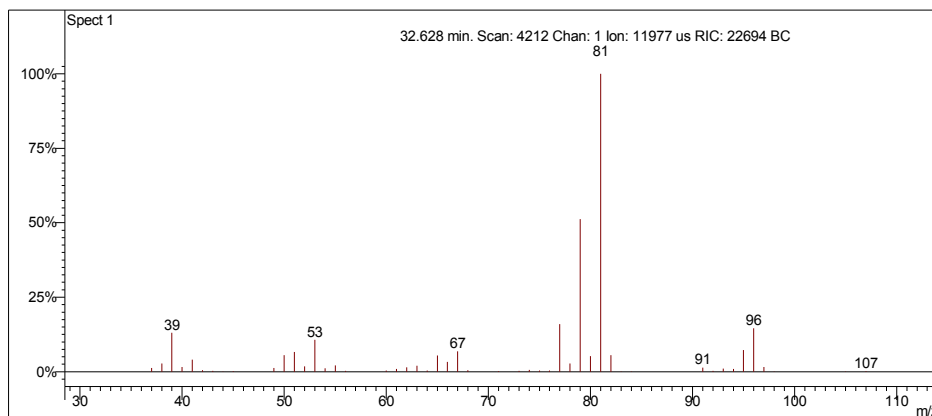
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 99$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_7H_{14} = C_7H_{15}^{+} + CH_3CN$		
$[M]^{+} = 98$	Transferência de carga.	Metanol
$CH_3OH^{+} + C_7H_{14} = C_7H_{14}^{+} + CH_3OH$		

2,4-dimetilpenta-1,4-dieno

Amostra de Gasolina Comum

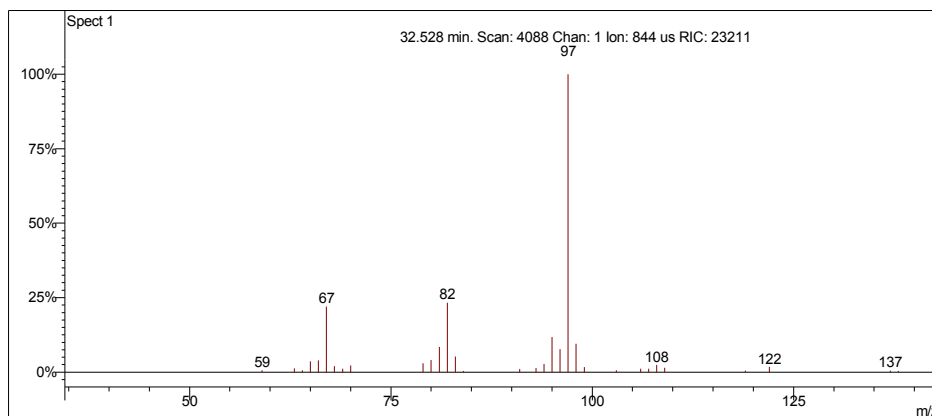
Scan 4212 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 4212, Time: 32.628 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 32.628 min. Scan: 4212 Chan: 1 Ion: 11977 us RIC: 22694 BC
Pair Count: 63 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

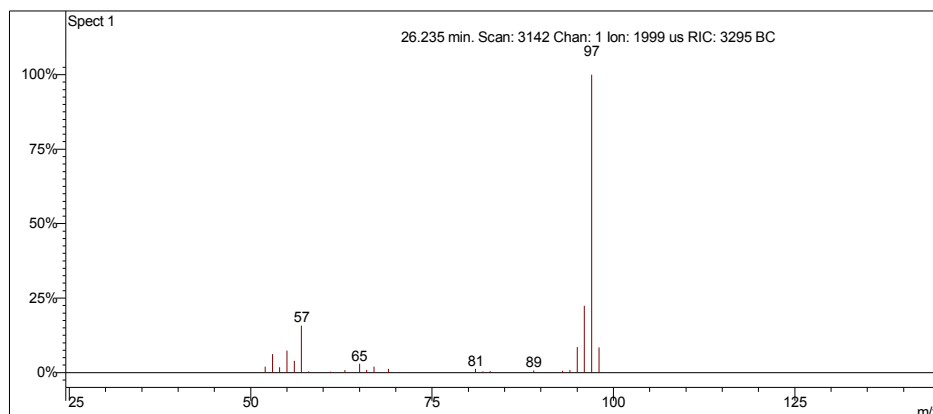
Scan 4088 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 4088, Time: 32.528 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 32.528 min. Scan: 4088 Chan: 1 Ion: 844 us RIC: 23211
Pair Count: 33 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 3142 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 3142, Time: 26.235 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 26.235 min. Scan: 3142 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 3295 BC
Pair Count: 25 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
96	$[M]^{+} = C_7H_{12}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
81	$[M - 15]^{+} = C_6H_9^{+}$	Perda de metila. Pico base.
67	$C_5H_7^{+}$	Perda de etila.

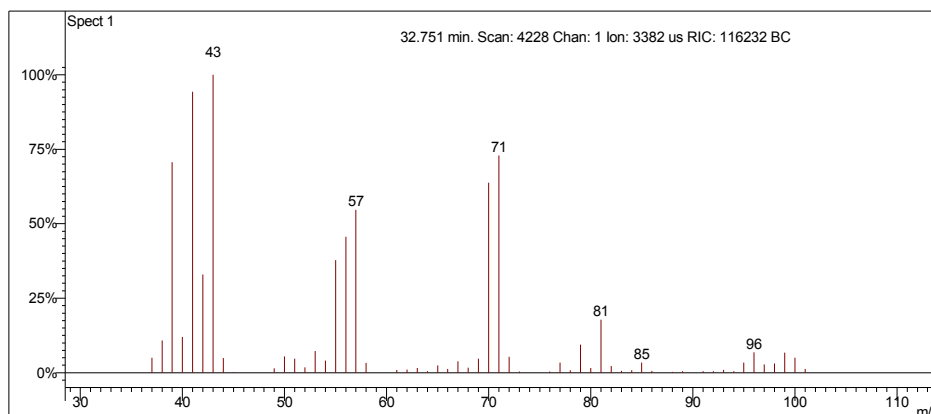
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 97$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_7H_{12} = C_7H_{13}^{+} + CH_3CN$		
$[M+1]^{+} = 97$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{+} + CH_3OH = CH_3OH_2^{+} + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^{+} + C_7H_{12} = C_7H_{13}^{+} + CH_3OH$		

Heptano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 4228 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 4228, Time: 32.751 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 32.751 min. Scan: 4228 Chan: 1 Ion: 3382 us RIC: 116232 BC
Pair Count: 59 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

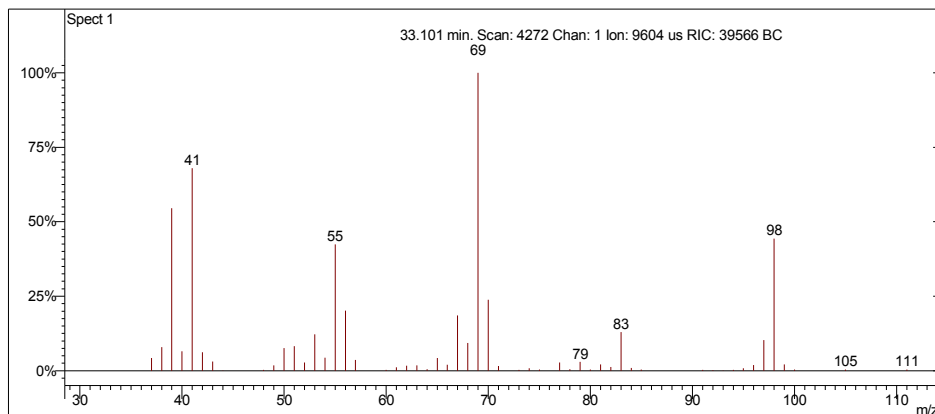
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
100	$[M]^{++} = C_7H_{16}^+$	Baixa intensidade do íon molecular indica molécula linear.
71	$[M - 29]^+ = C_5H_{10}^+$	Perda de etila.
57	$C_4H_9^+$	Fragmentação alílica com perda de propila.
43	$C_3H_7^+$	Fragmentação alílica com perda de butila.
41	$C_3H_5^+$	Rearranjos de hidrogênio.

3-metilex-3-eno

Amostra de Gasolina Comum

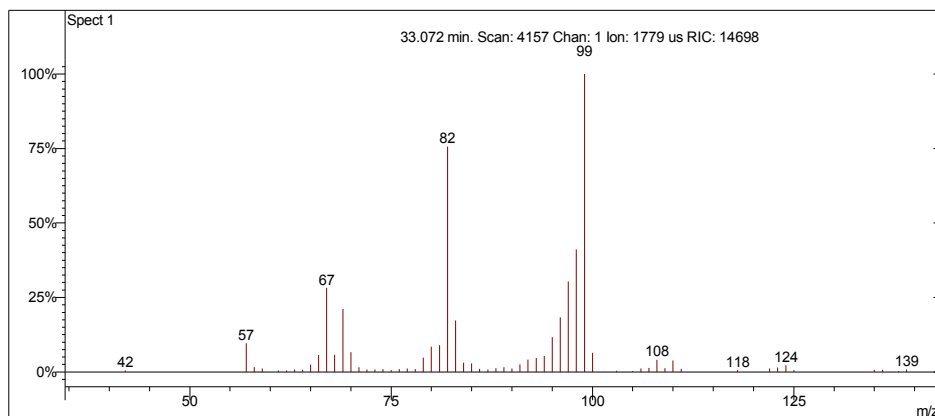
Scan 4272 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 4272, Time: 33.101 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 33.101 min. Scan: 4272 Chan: 1 Ion: 9604 us RIC: 39566 BC
Pair Count: 65 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

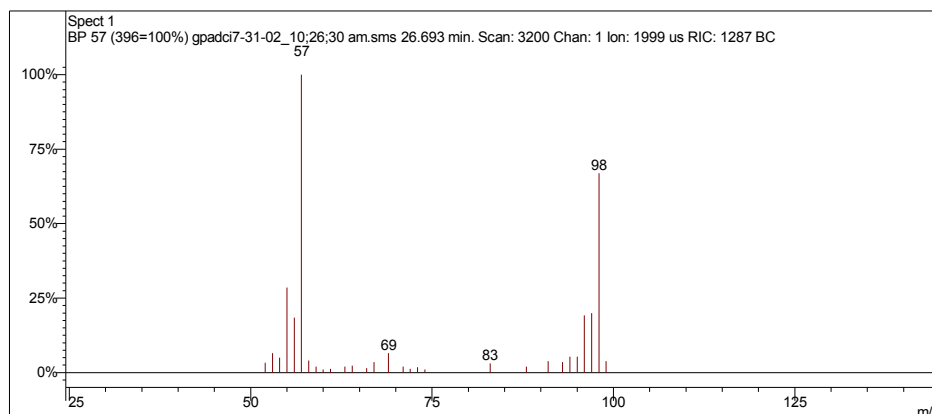
Scan 4157 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 4157, Time: 33.072 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 33.072 min. Scan: 4157 Chan: 1 Ion: 1779 us RIC: 14698
Pair Count: 64 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 3200 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 3200, Time: 26.693 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 26.693 min. Scan: 3200 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1287 BC
Pair Count: 29 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
98	$[M]^{+} = C_7H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
83	$[M - 15]^{+} = C_6H_{11}^{+}$	Perda de metila.
69	$[M - 29]^{+} = C_5H_{10}^{+}$	Perda de etila.
55	$C_4H_7^{+}$	Perda de propila.
41	$C_3H_5^{+}$	Rearranjos de hidrogênio.

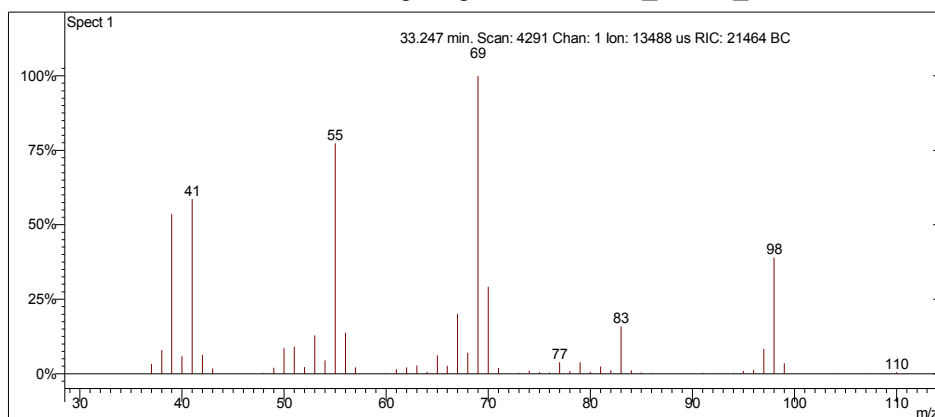
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 99$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_7H_{14} = C_7H_{15}^{+} + CH_3CN$		
$[M]^{+} = 98$	Transferência de carga.	Metanol
$CH_3OH^{+} + C_7H_{14} = C_7H_{14}^{+} + CH_3OH$		

(E)-3-metilex-2-eno

Amostra de Gasolina Comum

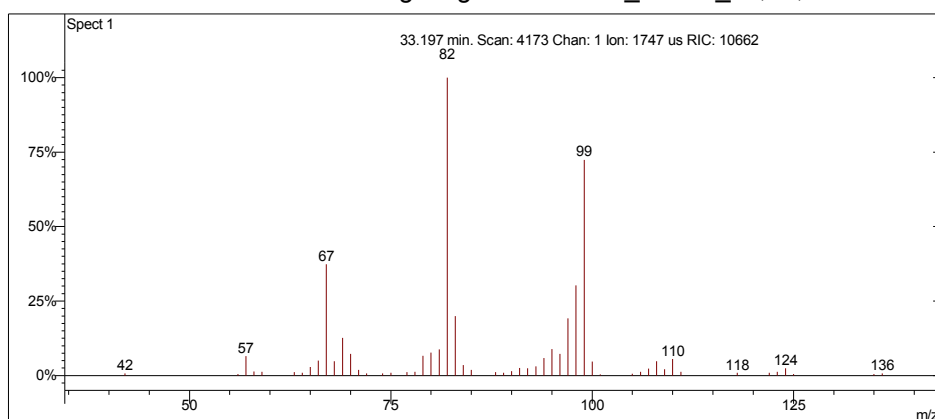
Scan 4291 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 4291, Time: 33.247 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 33.247 min. Scan: 4291 Chan: 1 Ion: 13488 us RIC: 21464 BC
Pair Count: 76 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

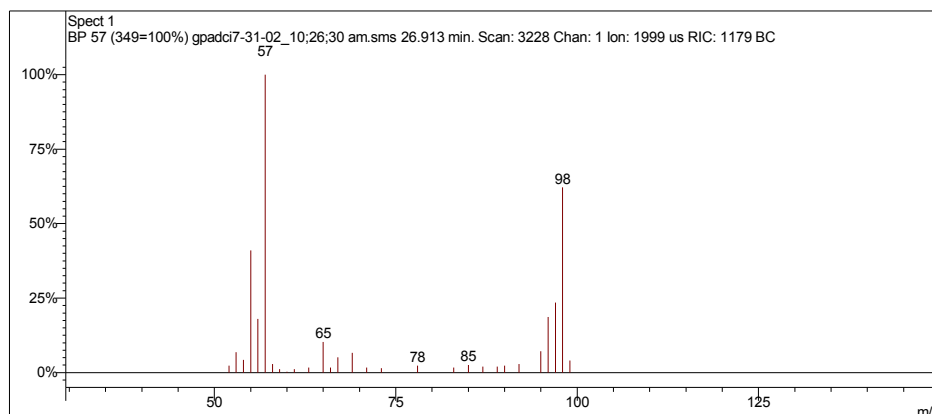
Scan 4173 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 4173, Time: 33.197 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 33.197 min. Scan: 4173 Chan: 1 Ion: 1747 us RIC: 10662
Pair Count: 56 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 3228 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 3228, Time: 26.913 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 26.913 min. Scan: 3228 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1179 BC
Pair Count: 29 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
98	$[M]^{++} = C_7H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
83	$[M - 15]^+ = C_6H_{11}^+$	Perda de metila.
69	$[M - 29]^+ = C_5H_{10}^+$	Perda de etila.
55	$C_4H_7^+$	Perda de propila.
41	$C_3H_5^+$	Rearranjos de hidrogênio.

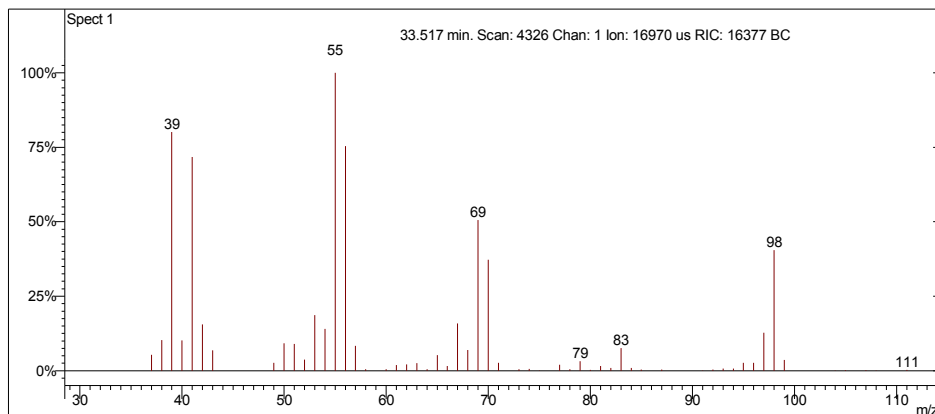
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 99$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_7H_{14} = C_7H_{15}^+ + CH_3CN$		
$[M]^{++} = 98$	Transferência de carga.	Metanol
$CH_3OH_2^{++} + C_7H_{14} = C_7H_{14}^{++} + CH_3OH$		

(E)-hept-2-eno

Amostra de Gasolina Comum

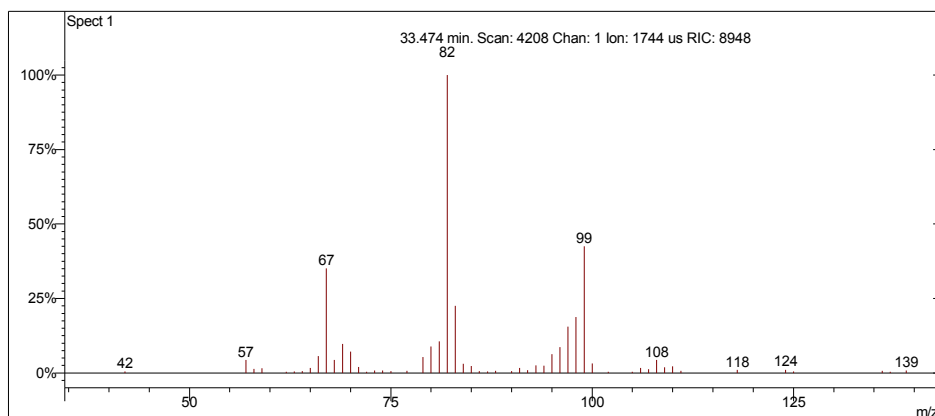
Scan 4326 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 4326, Time: 33.517 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 33.517 min. Scan: 4326 Chan: 1 Ion: 16970 us RIC: 16377 BC
Pair Count: 77 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

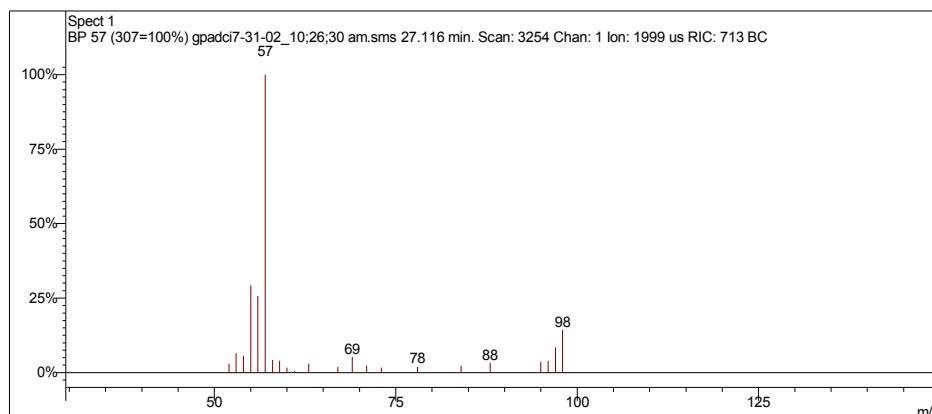
Scan 4208 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 4208, Time: 33.474 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 33.474 min. Scan: 4208 Chan: 1 Ion: 1744 us RIC: 8948
Pair Count: 55 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 3254 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 3254, Time: 27.116 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 27.116 min. Scan: 3254 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 713 BC
Pair Count: 22 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
98	$[M]^{+} = C_7H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
83	$[M - 15]^{+} = C_6H_{11}^{+}$	Perda de metila.
69	$[M - 29]^{+} = C_5H_{10}^{+}$	Perda de etila.
55	$C_4H_7^{+}$	Perda de propila.
41	$C_3H_5^{+}$	Perda de butila.

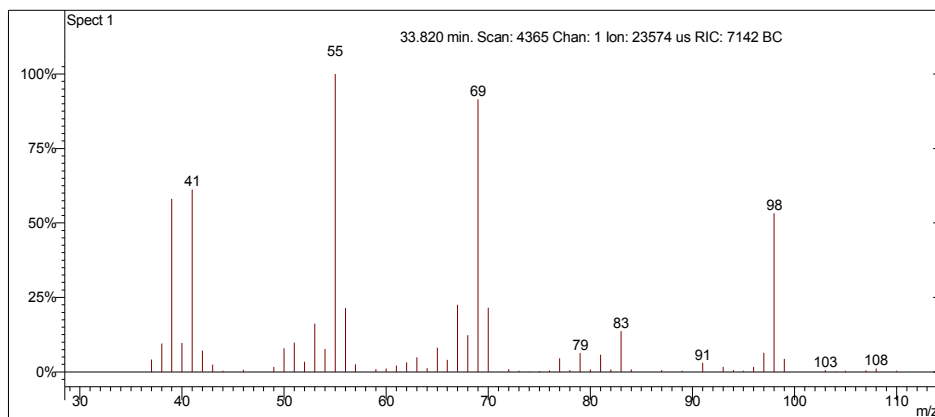
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 99$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_7H_{14} = C_7H_{15}^{+} + CH_3CN$		
$[M]^{+} = 98$	Transferência de carga.	Metanol
$CH_3OH_2^{++} + C_7H_{14} = C_7H_{14}^{++} + CH_3OH$		

1,1-dietilciclopropano

Amostra de Gasolina Comum

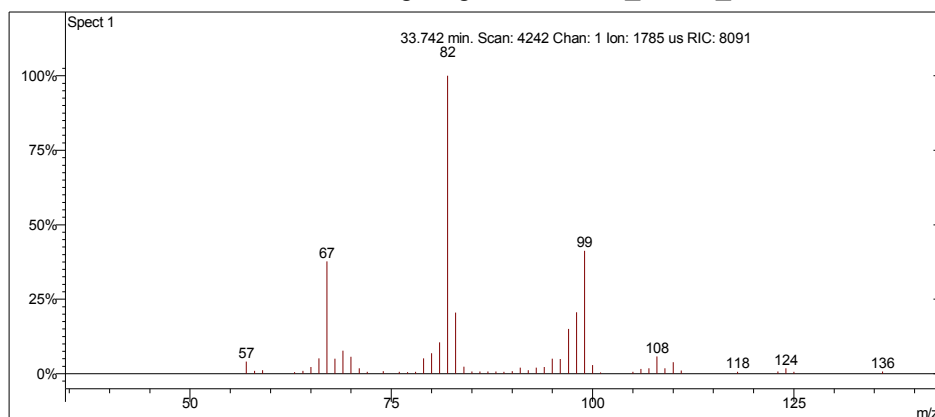
Scan 4365 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 4365, Time: 33.820 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 33.820 min. Scan: 4365 Chan: 1 Ion: 23574 us RIC: 7142 BC
Pair Count: 85 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

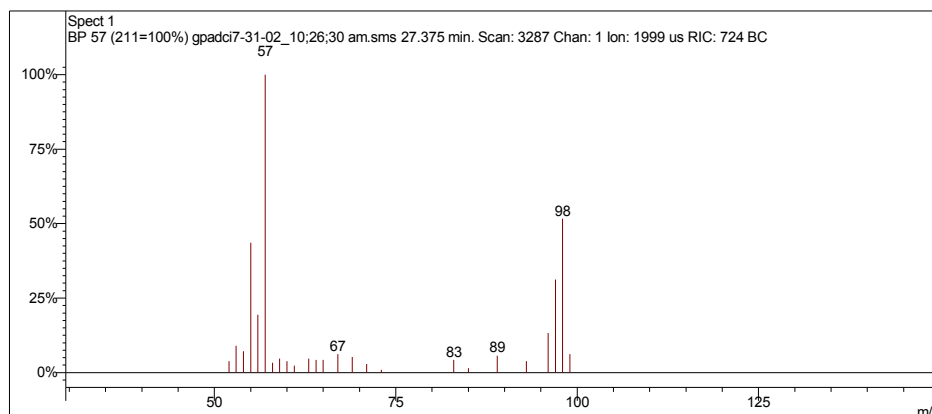
Scan 4242 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 4242, Time: 33.742 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 33.742 min. Scan: 4242 Chan: 1 Ion: 1785 us RIC: 8091
Pair Count: 53 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 3287 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 3287, Time: 27.375 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 27.375 min. Scan: 3287 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 724 BC
Pair Count: 25 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
98	$[M]^{+} = C_7H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
83	$[M - 15]^{+} = C_6H_{11}^{+}$	Perda de metila.
69	$[M - 29]^{+} = C_5H_{10}^{+}$	Perda de etila.
55	$C_4H_7^{+}$	Perda de propila.
41	$C_3H_5^{+}$	Perda de propila com rearranjos de hidrogênio.

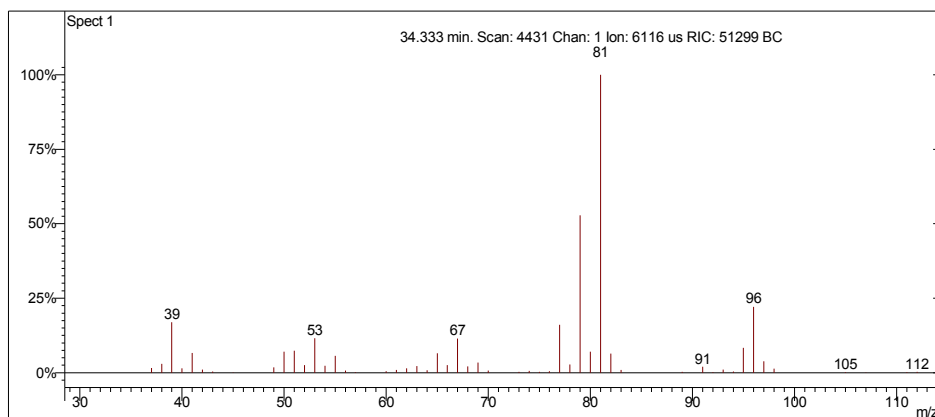
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 99$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3NH_2^{+} + CH_3NH_2 = CH_3NH_3^{+} + \cdot CH_3NH$ $CH_3NH_3^{+} + C_7H_{14} = C_7H_{15}^{+} + CH_3NH_2$		
$[M]^{+} = 98$	Transferência de carga.	Metanol
$CH_3OH_2^{+} + C_7H_{14} = C_7H_{14}^{+} + CH_3OH$		

4-metilexa-1,4-dieno

Amostra de Gasolina Comum

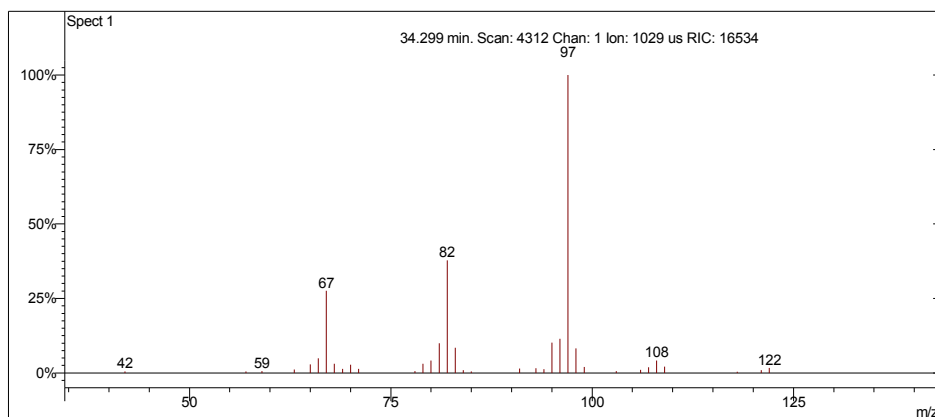
Scan 4431 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 4431, Time: 34.333 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 34.333 min. Scan: 4431 Chan: 1 Ion: 6116 us RIC: 51299 BC
Pair Count: 55 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

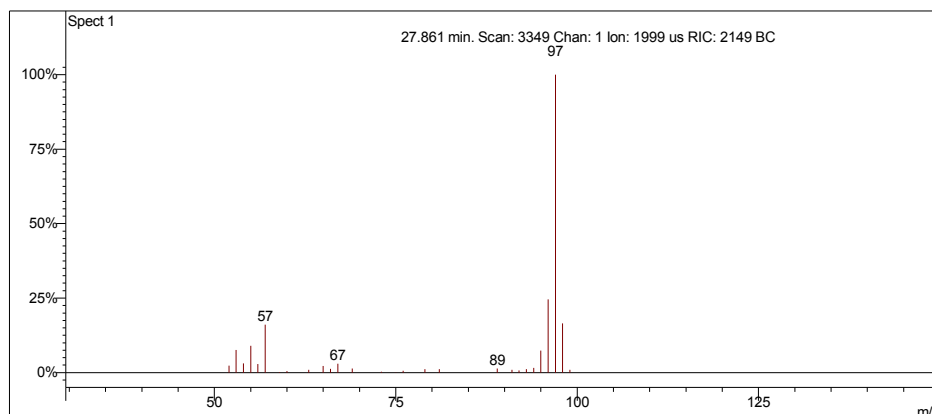
Scan 4312 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 4312, Time: 34.299 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 34.299 min. Scan: 4312 Chan: 1 Ion: 1029 us RIC: 16534
Pair Count: 37 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 3349 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 3349, Time: 27.861 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 27.861 min. Scan: 3349 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 2149 BC
Pair Count: 28 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
96	$[M]^+ = C_7H_{12}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
81	$[M - 15]^+ = C_6H_9^+$	Perda de metila. Pico base.
67	$C_5H_7^+$	Perda de etila.

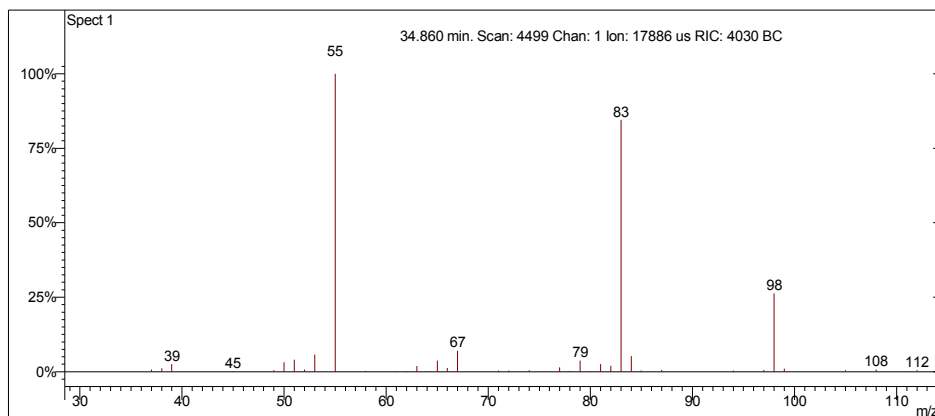
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 97$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+\bullet} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \bullet CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_7H_{12} = C_7H_{13}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 97$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{+\bullet} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \bullet CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_7H_{12} = C_7H_{13}^+ + CH_3OH$		

2,3-dimetilpent-2-eno

Amostra de Gasolina Comum

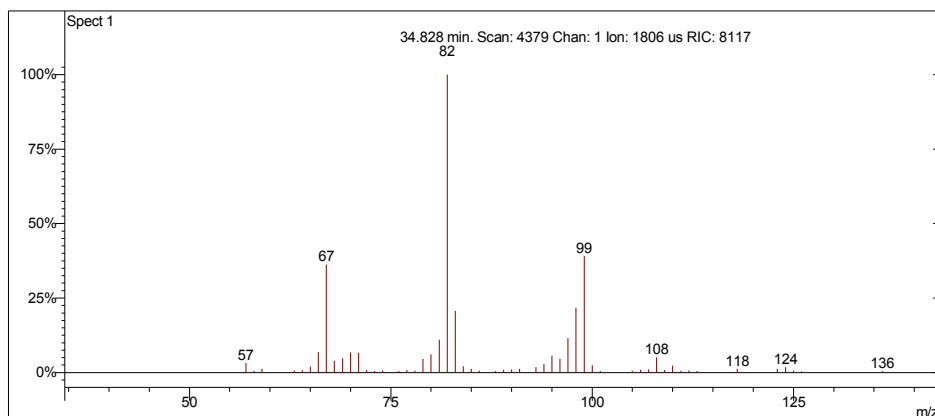
Scan 4499 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 4499, Time: 34.860 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 34.860 min. Scan: 4499 Chan: 1 Ion: 17886 us RIC: 4030 BC
Pair Count: 65 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

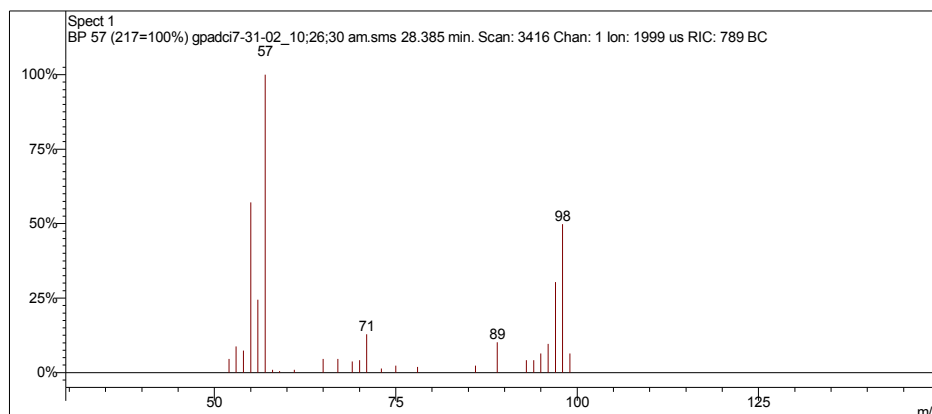
Scan 4379 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 4379, Time: 34.828 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 34.828 min. Scan: 4379 Chan: 1 Ion: 1806 us RIC: 8117
Pair Count: 57 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 3416 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 3416, Time: 28.385 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 28.385 min. Scan: 3416 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 789 BC
Pair Count: 26 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
98	$[M]^{++} = C_7H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
83	$[M - 15]^+ = C_6H_{11}^+$	Perda de metila.
55	$C_4H_7^+$	Perda de propila.

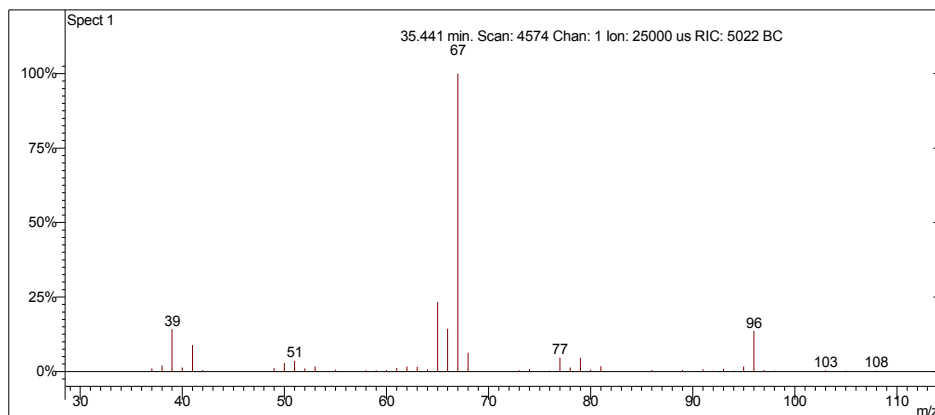
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 99$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_7H_{14} = C_7H_{15}^+ + CH_3CN$		
$[M]^{++} = 98$	Transferência de carga.	Metanol
$CH_3OH_2^{++} + C_7H_{14} = C_7H_{14}^{++} + CH_3OH$		

3-etilciclopenteno

Amostra de Gasolina Comum

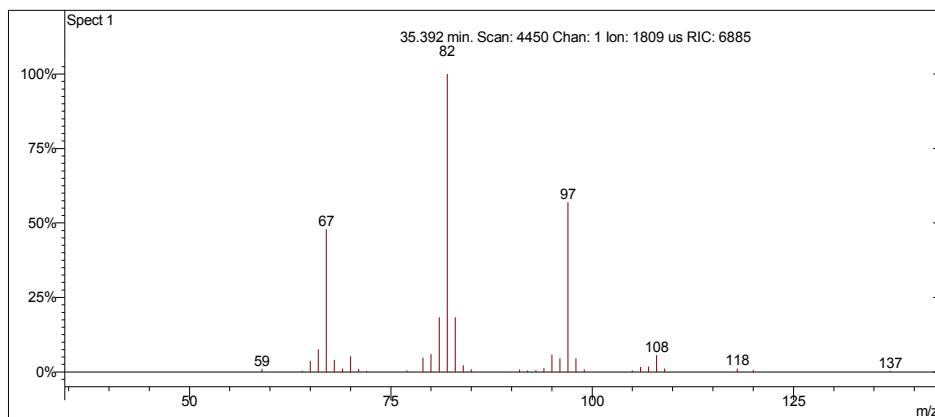
Scan 4574 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 4574, Time: 35.441 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 35.441 min. Scan: 4574 Chan: 1 Ion: 25000 us RIC: 5022 BC
Pair Count: 77 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

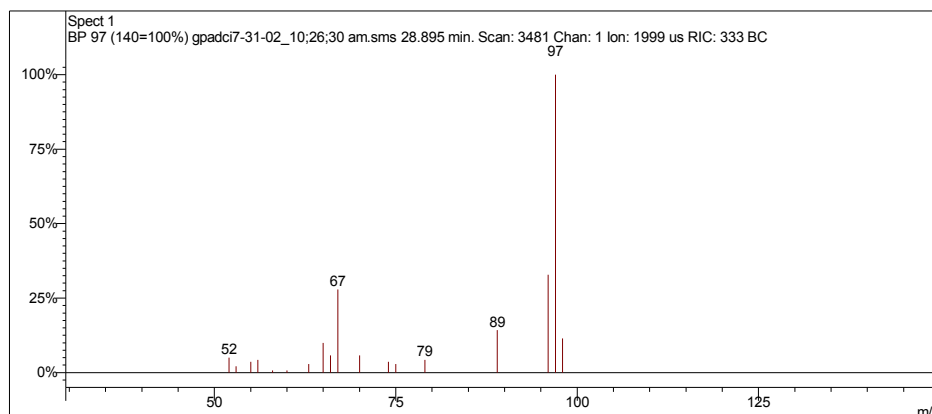
Scan 4450 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 4450, Time: 35.392 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 35.392 min. Scan: 4450 Chan: 1 Ion: 1809 us RIC: 6885
Pair Count: 36 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 3481 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 3481, Time: 28.895 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 28.895 min. Scan: 3481 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 333 BC
Pair Count: 18 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
96	$[M]^+ = C_7H_{12}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
81	$[M - 15]^+ = C_6H_9^+$	Perda de metila.
67	$[M - 29]^+ = C_5H_7^+$	Perda de etila. Pico base.

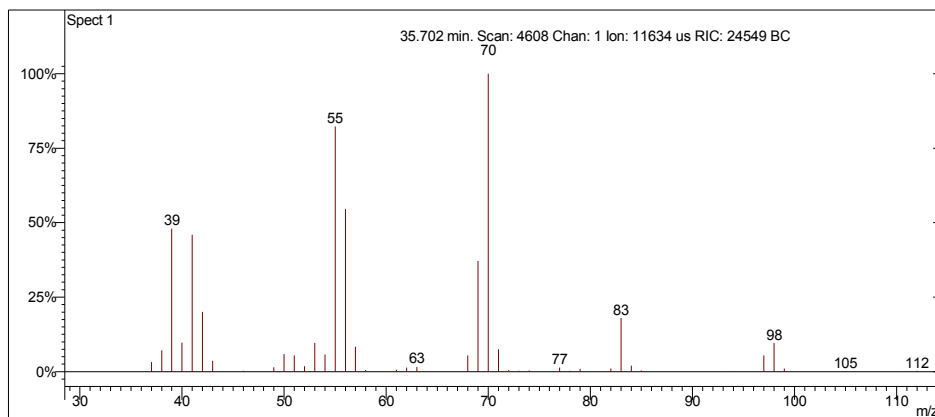
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 97$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_7H_{12} = C_7H_{13}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 97$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_7H_{12} = C_7H_{13}^+ + CH_3OH$		

(Z)-1,2-dimetilciclopentano

Amostra de Gasolina Comum

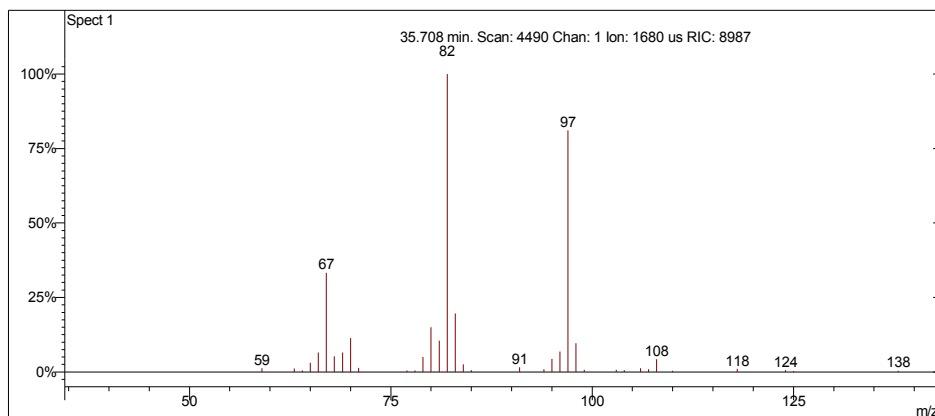
Scan 4608 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 4608, Time: 35.702 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 35.702 min. Scan: 4608 Chan: 1 Ion: 11634 us RIC: 24549 BC
Pair Count: 62 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

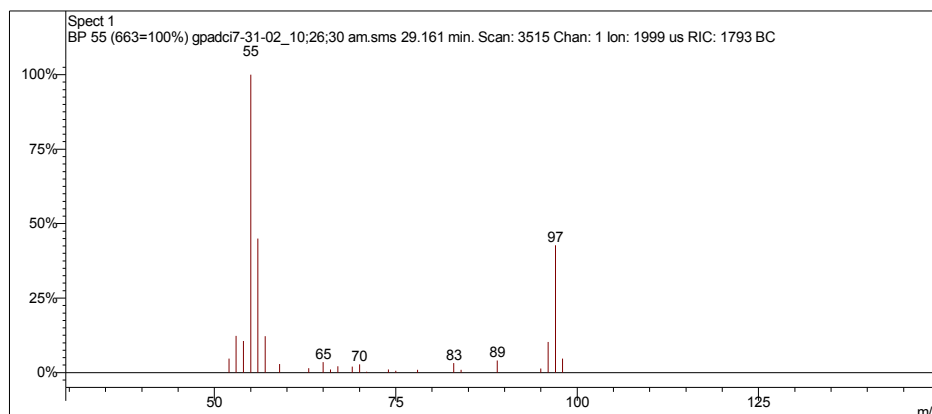
Scan 4490 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 4490, Time: 35.708 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 35.708 min. Scan: 4490 Chan: 1 Ion: 1680 us RIC: 8987
Pair Count: 36 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 3515 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 3515, Time: 29.161 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 29.161 min. Scan: 3515 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1793 BC
Pair Count: 24 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
98	$[M]^{++} = C_7H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
83	$[M - 15]^+ = C_6H_{11}^+$	Perda de metila.
70	$[M - 28]^+ = C_5H_9^+$	Perda de eteno.
55	$C_4H_7^+$	Fragmentação no anel com perda de propila.
41	$C_3H_5^+$	Rearranjos de hidrogênio.

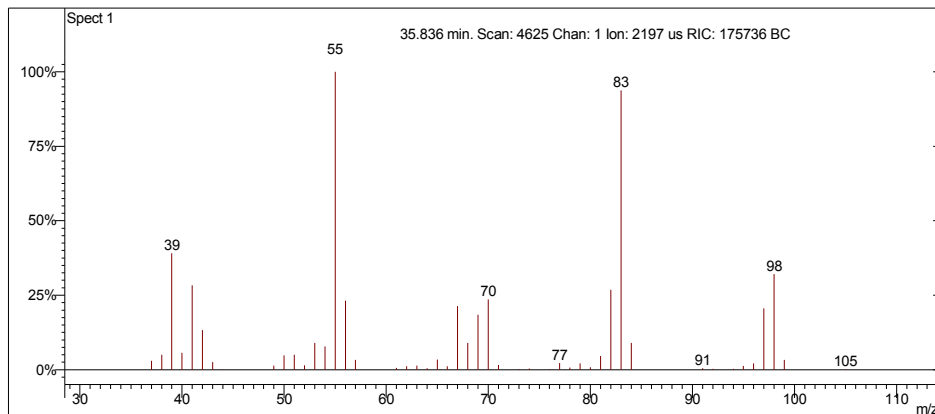
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M - 1]^+ = 97$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_7H_{14} = C_7H_{13}^+ + CH_3CN$		
$[M - 1]^+ = 97$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{++} = CH_2OH^+ + \cdot H$ $CH_2OH^+ + C_7H_{14} = C_7H_{13}^+ + CH_3OH$		

Metilcicloexano

Amostra de Gasolina Comum

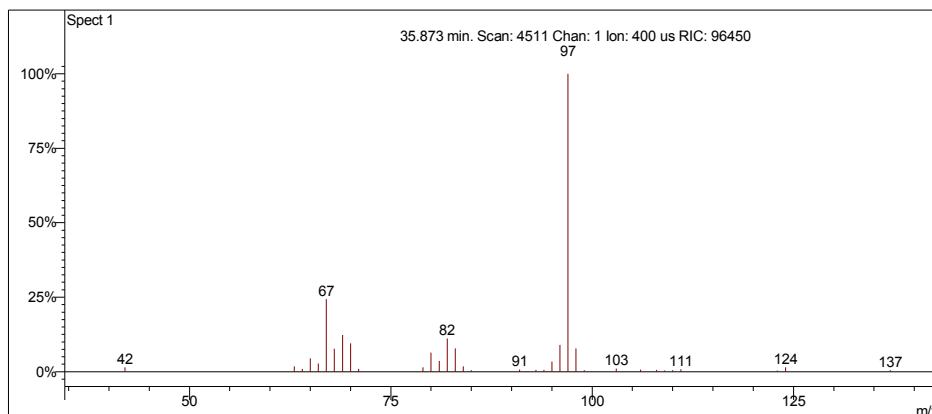
Scan 4625 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 4625, Time: 35.836 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 35.836 min. Scan: 4625 Chan: 1 Ion: 2197 us RIC: 175736 BC
Pair Count: 48 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

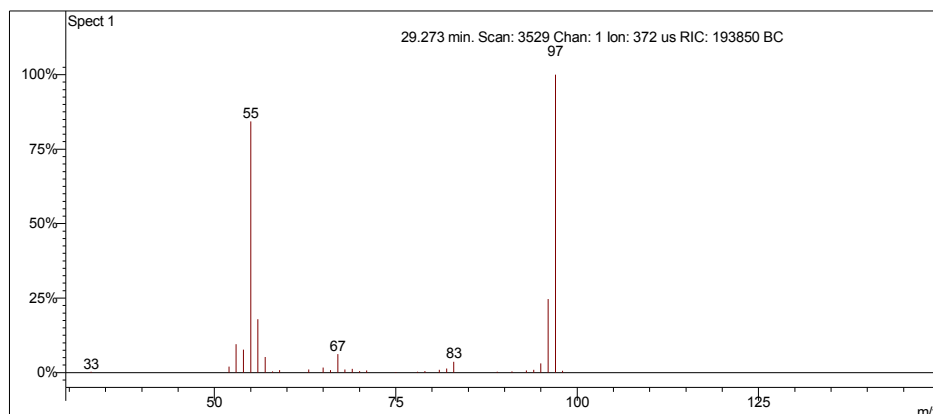
Scan 4511 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 4511, Time: 35.873 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 35.873 min. Scan: 4511 Chan: 1 Ion: 400 us RIC: 96450
Pair Count: 34 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 3529 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 3529, Time: 29.273 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 29.273 min. Scan: 3529 Chan: 1 Ion: 372 us RIC: 193850 BC
 Pair Count: 31 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
98	$[M]^{+} = C_7H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
83	$[M - 15]^{+} = C_6H_{11}^{+}$	Perda de metila.
70	$[M - 28]^{+} = C_5H_{10}^{+}$	Perda de eteno.
55	$C_4H_7^{+}$	Fragmentação do anel com perda de propila.
41	$C_3H_5^{+}$	Rearranjos de hidrogênio.

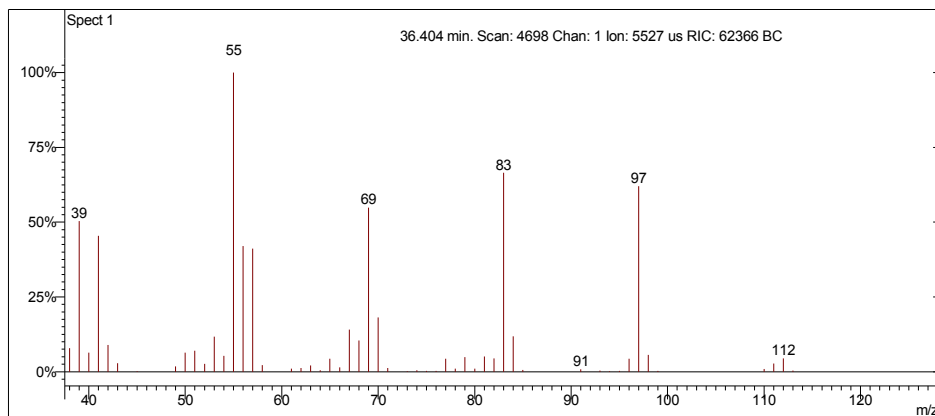
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M - 1]^{+} = 97$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} = CH_2CN^{+} + \cdot H$ $CH_2CN^{+} + C_7H_{14} = C_7H_{13}^{+} + CH_3CN$		
$[M - 1]^{+} = 97$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{++} = CH_2OH^{+} + \cdot H$ $CH_2OH^{+} + C_7H_{14} = C_7H_{13}^{+} + CH_3OH$		

1,1,3-trimetilciclopentano

Amostra de Gasolina Comum

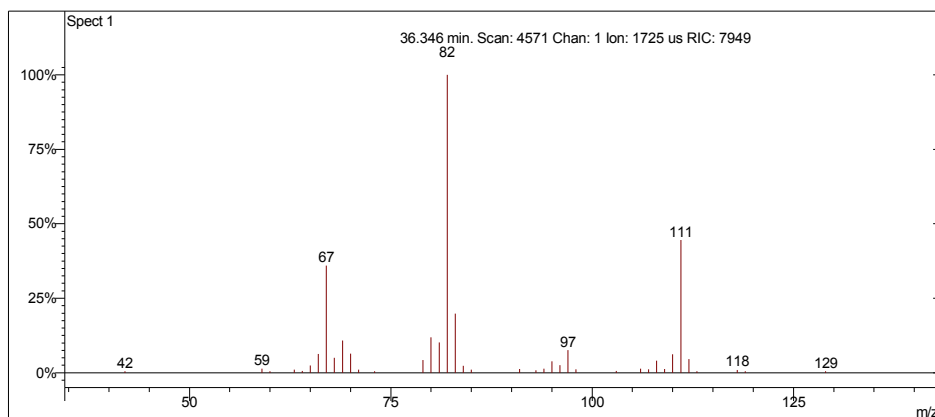
Scan 4698 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 4698, Time: 36.404 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 36.404 min. Scan: 4698 Chan: 1 Ion: 5527 us RIC: 62366 BC
Pair Count: 57 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 4571 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 4571, Time: 36.346 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 36.346 min. Scan: 4571 Chan: 1 Ion: 1725 us RIC: 7949
Pair Count: 39 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
112	$[M]^{+\bullet} = C_8H_{16}^{+\bullet}$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear.
97	$[M - 15]^+ = C_7H_{13}^+$	Perda de metila
83	$[M - 29]^+ = C_6H_{11}^+$	Perda de etila.
69	$C_5H_9^+$	Fragmentação do anel com perda de propila.
55	$C_4H_7^+$	Fragmentação do anel com perda de butila.

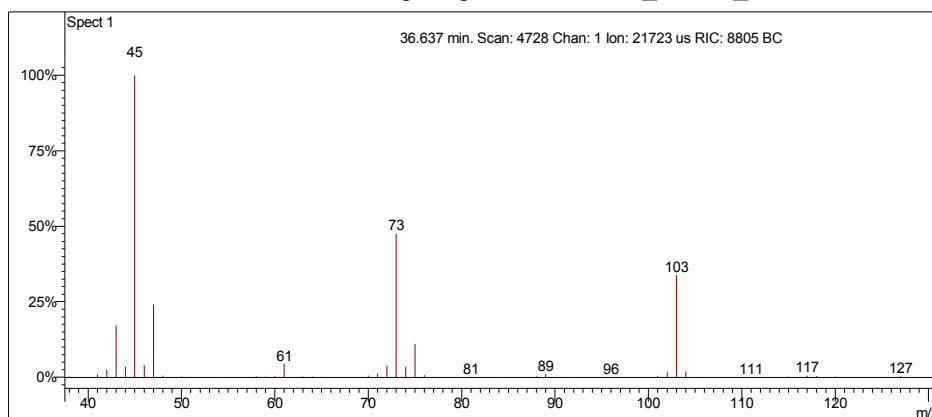
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M - 1]^+ = 111$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+\bullet} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_8H_{16} = C_8H_{15}^+ + CH_3CN$		
sem sinal		Metanol
Ionização química instável.		

1,1-dietoxietano

Amostra de Gasolina Comum

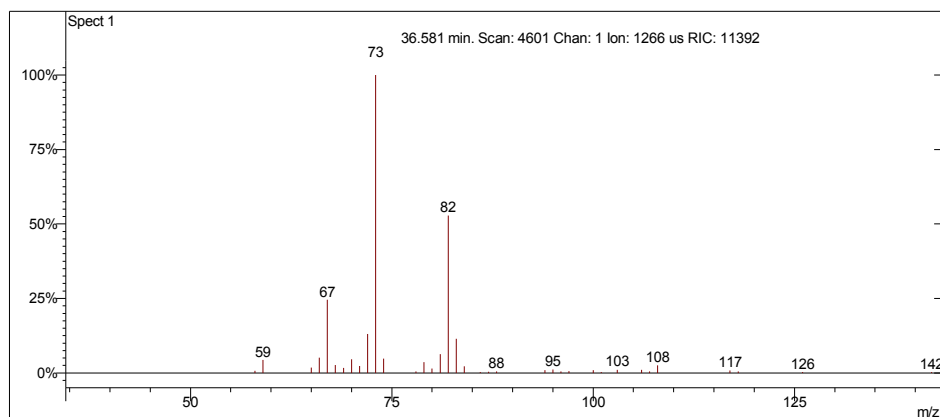
Scan 4728 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 4728, Time: 36.637 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 36.637 min. Scan: 4728 Chan: 1 Ion: 21723 us RIC: 8805 BC
Pair Count: 70 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

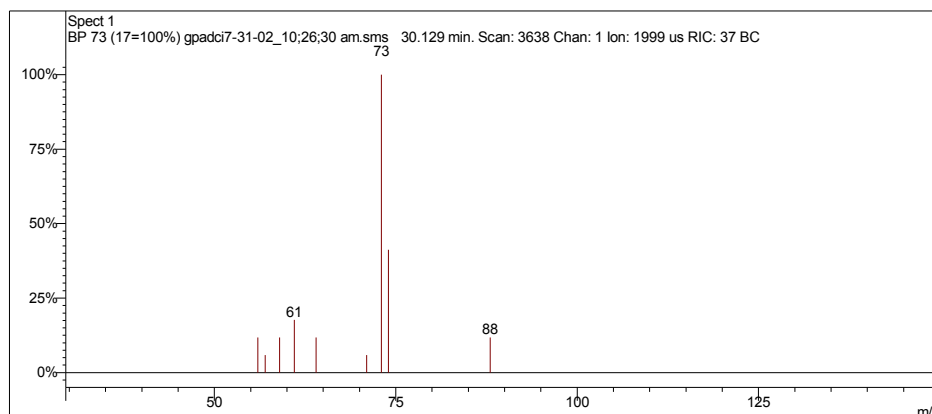
Scan 4601 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 4601, Time: 36.581 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 36.581 min. Scan: 4601 Chan: 1 Ion: 1266 us RIC: 11392
Pair Count: 37 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 3638 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 3638, Time: 30.129 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 30.129 min. Scan: 3638 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 37 BC
Pair Count: 9 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
118	$[M]^{++} = C_6H_{14}O_2^+$	Íon molecular de baixa intensidade revela molécula linear.
103	$[M - 15]^+ = C_5H_{11}O_2^+$	Perda de metila.
73	$C_4H_9O^+$	Fragmentação alílica.
45	$C_2H_5O^+$	Fragmentação alílica.

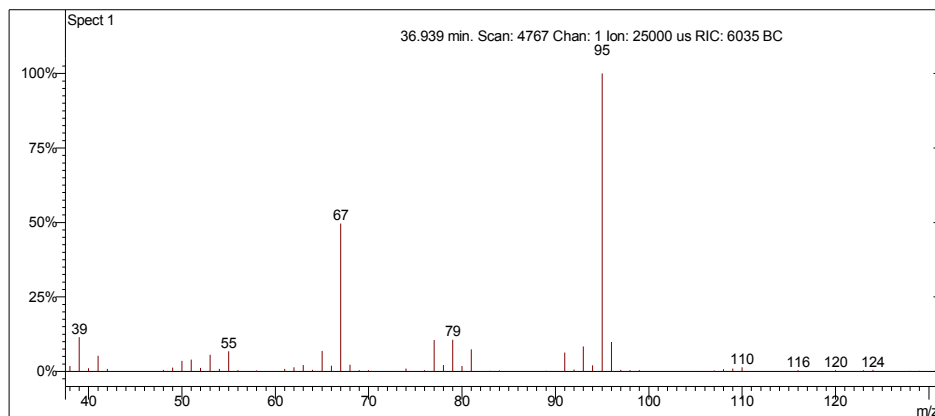
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
Sem sinal		Acetonitrila
Ionização química instável.		
sem sinal		Metanol
Ionização química instável.		

Desconhecido 6

Amostra de Gasolina Comum

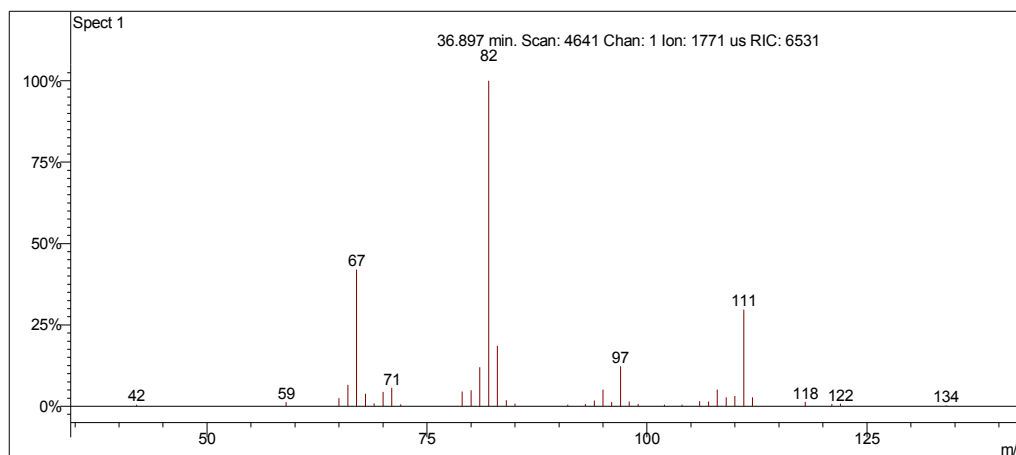
Scan 4767 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 4767, Time: 36.939 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 36.939 min. Scan: 4767 Chan: 1 Ion: 25000 us RIC: 6035 BC
Pair Count: 86 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 4641 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 4641, Time: 36.897 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 36.897 min. Scan: 4641 Chan: 1 Ion: 1771 us RIC: 6531
Pair Count: 39 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
110	$[M]^+ = C_8H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância, confirmado por ionização química.
95	$[M - 15]^+ = C_7H_{11}^+$	Perda de metila. Pico base.
67	$[M - 43]^+ = C_3H_7^+$	Fragmentação do anel.
Conclusão: Olefínico cíclico com 8 carbonos.		

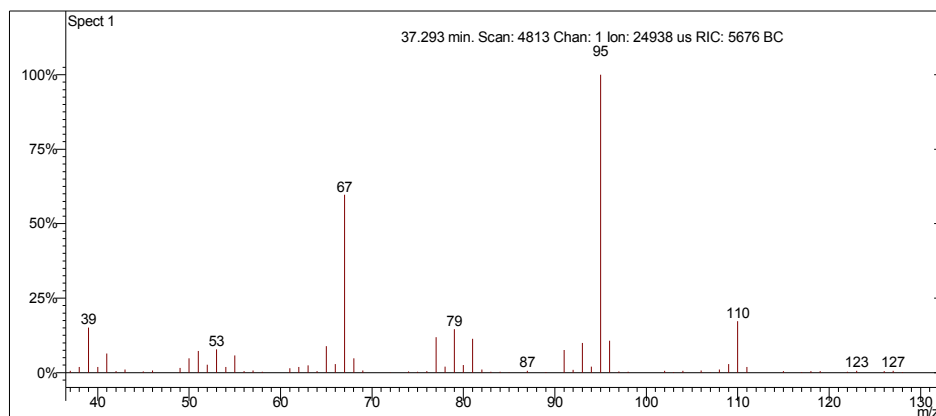
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 111$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^+ + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_8H_{14} = C_8H_{15}^+ + CH_3CN$		
sem sinal	.	Metanol
Quantidade desprezível.		

Desconhecido 7

Amostra de Gasolina Comum

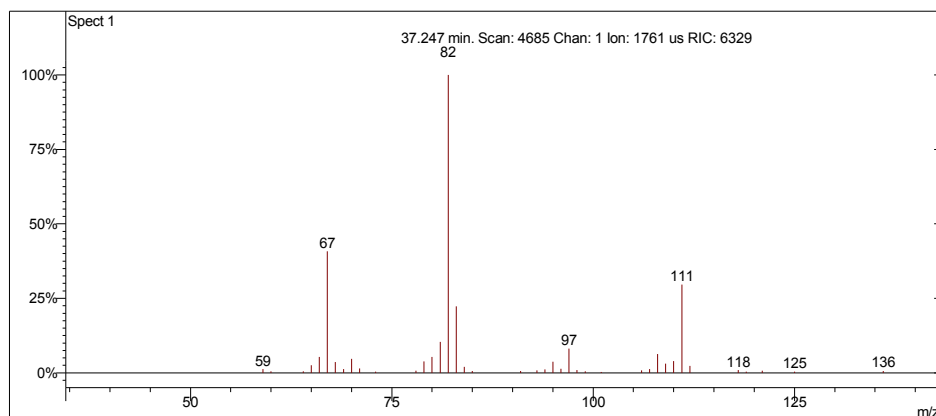
Scan 4813 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 4813, Time: 37.293 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 37.293 min. Scan: 4813 Chan: 1 Ion: 24938 us RIC: 5676 BC
Pair Count: 92 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 4685 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 4685, Time: 37.247 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 37.247 min. Scan: 4685 Chan: 1 Ion: 1761 us RIC: 6329
Pair Count: 41 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
110	$[M]^+ = C_8H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância, confirmado por ionização química.
95	$[M - 15]^+ = C_7H_{11}^+$	Perda de metila. Pico base.
67	$[M - 43]^+ = C_3H_7^+$	Fragmentação do anel.
Conclusão: Olefínico cíclico com 8 carbonos.		

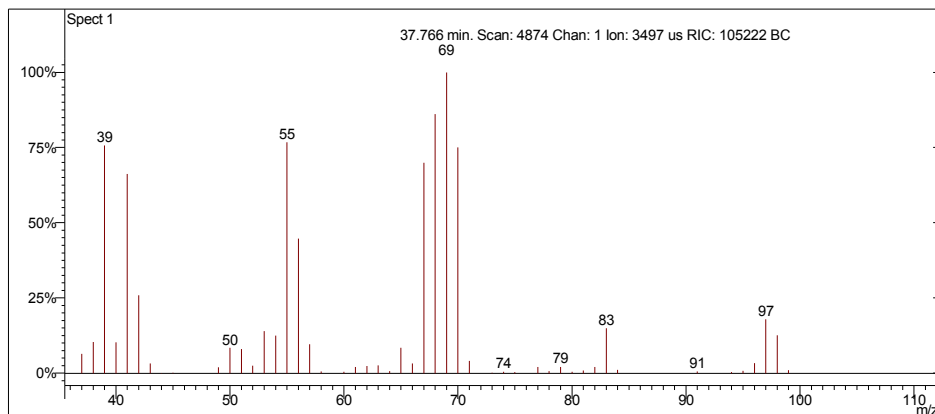
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 111$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^+ + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_8H_{14} = C_8H_{15}^+ + CH_3CN$		
sem sinal		Metanol
Quantidade desprezível		

Etilciclopentano

Amostra de Gasolina Comum

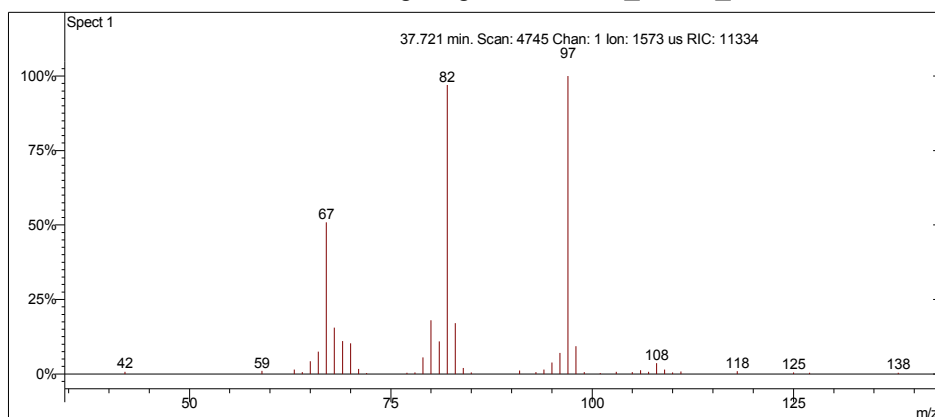
Scan 4874 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 4874, Time: 37.766 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 37.766 min. Scan: 4874 Chan: 1 Ion: 3497 us RIC: 105222 BC
Pair Count: 51 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

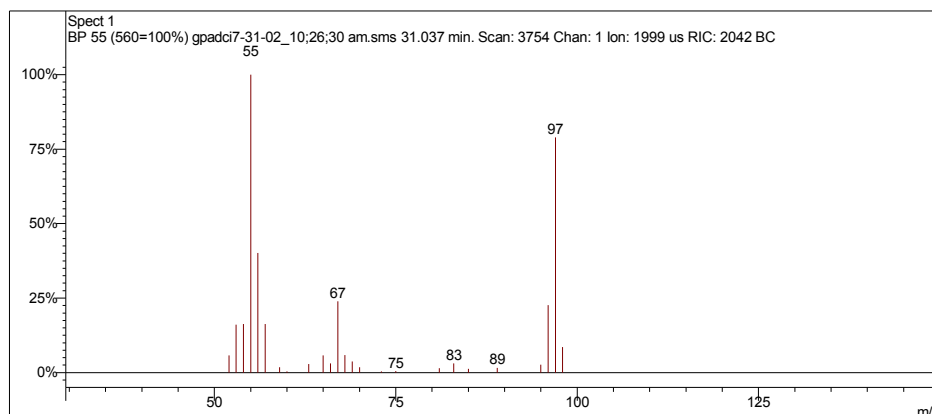
Scan 4745 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 4745, Time: 37.721 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 37.721 min. Scan: 4745 Chan: 1 Ion: 1573 us RIC: 11334
Pair Count: 42 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 3754 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 3754, Time: 31.037 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 31.037 min. Scan: 3754 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 2042 BC
Pair Count: 25 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
98	$[M]^{+} = C_7H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
83	$[M - 15]^{+} = C_6H_{11}^{+}$	Perda de metila.
70	$[M - 28]^{+} = C_5H_9^{+}$	Perda de eteno.
69	$[M - 29]^{+} = C_5H_8^{+}$	Perda de etila. Pico base.
68	$C_5H_8^{+}$	Perda de etano.
67	$C_5H_7^{+}$	Perda de etano com rearranjos de hidrogênio.
55	$C_4H_7^{+}$	Perda de propila.
41	$C_3H_5^{+}$	Rearranjos de hidrogênio.

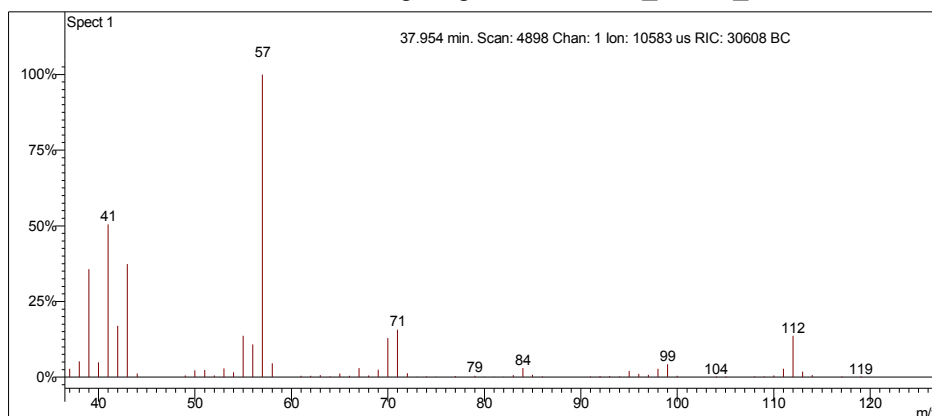
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M - 1]^+ = 97$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\bullet} = \text{CH}_2\text{CN}^+ + \cdot\text{H}$ $\text{CH}_2\text{CN}^+ + \text{C}_7\text{H}_{14} = \text{C}_7\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M - 1]^+ = 97$	Abstração de hidreto.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\bullet} = \text{CH}_2\text{OH}^+ + \cdot\text{H}$ $\text{CH}_2\text{OH}^+ + \text{C}_7\text{H}_{14} = \text{C}_7\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

2,5-dimetilexano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 4898 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 4898, Time: 37.954 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 37.954 min. Scan: 4898 Chan: 1 Ion: 10583 us RIC: 30608 BC
Pair Count: 72 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Quantidade desprezível.

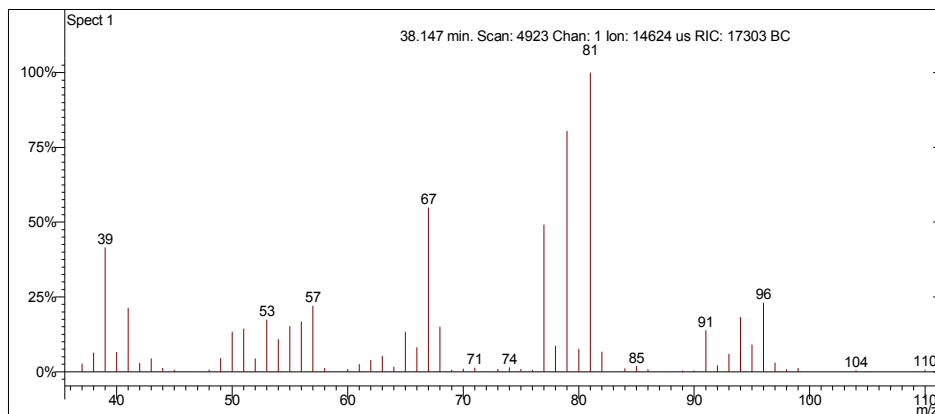
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
114 (ausente)	$[M]^{+} = C_8H_{18}^{+}$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear.
99	$[M - 15]^{+} = C_7H_{15}^{+}$	Perda de metila
71	$C_5H_{11}^{+}$	Perda de propila.
57	$C_4H_9^{+}$	Perda de isobutila.

3-metilcicloexeno

Amostra de Gasolina Comum

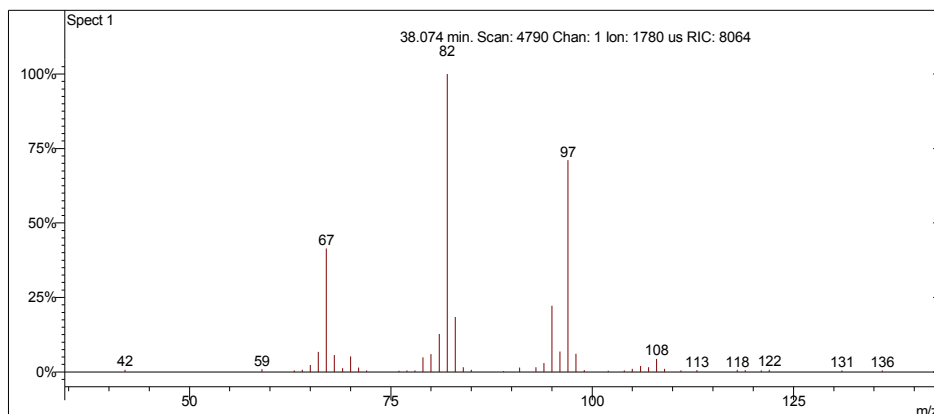
Scan 4923 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 4923, Time: 38.147 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 38.147 min. Scan: 4923 Chan: 1 Ion: 14624 us RIC: 17303 BC
Pair Count: 75 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

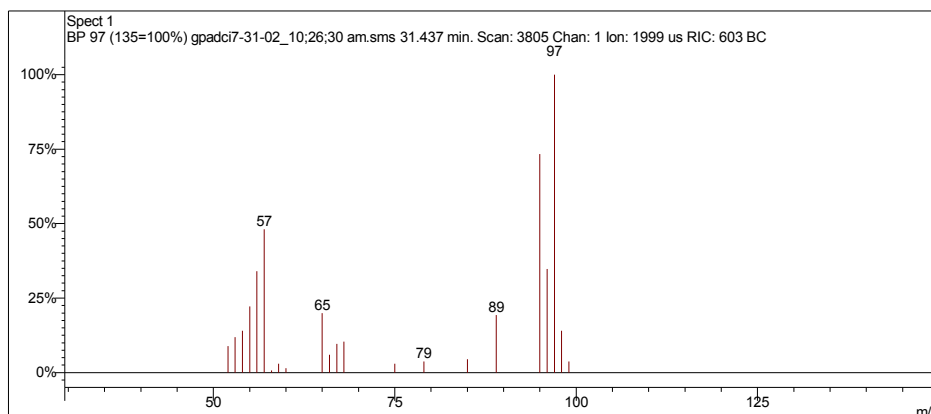
Scan 4790 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 4790, Time: 38.074 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 38.074 min. Scan: 4790 Chan: 1 Ion: 1780 us RIC: 8064
Pair Count: 47 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 3805 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 3805, Time: 31.437 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 31.437 min. Scan: 3805 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 603 BC
Pair Count: 22 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
96	$[M]^+ = C_7H_{12}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
81	$[M - 15]^+ = C_6H_9^+$	Perda de metila. Pico base.
67	$C_5H_7^+$	Fragmentação do anel com perda de etila.

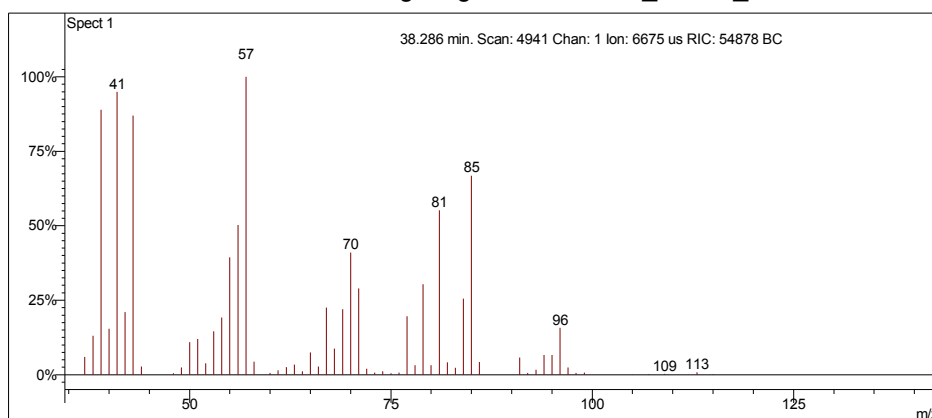
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 97$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^+ + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_7H_{12} = C_7H_{13}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 97$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^+ + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_7H_{12} = C_7H_{13}^+ + CH_3OH$		

2,4-dimetilexano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 4941 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 4941, Time: 38.286 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 38.286 min. Scan: 4941 Chan: 1 Ion: 6675 us RIC: 54878 BC
Pair Count: 64 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

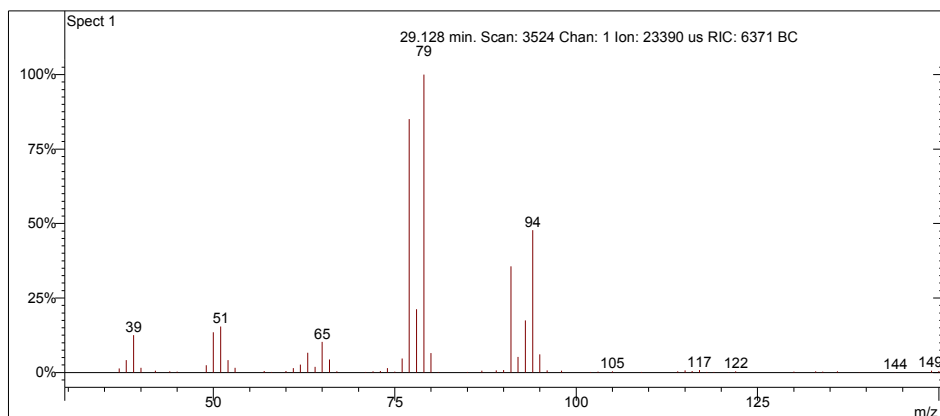
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
114 (ausente)	$[M]^+ = C_8H_{18}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear.
85	$[M - 29]^+ = C_6H_{13}^+$	Perda de etila.
71	$C_5H_{11}^+$	Perda de propila.
57	$C_4H_9^+$	Perda de butila.

Desconhecido 8

Amostra de Gasolina Comum

Scan 3524 from c:\... \amostras\cgms\gas_aditivada_4-4-05_2;23;57 pm.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gas_aditivada_4-4-05_2;23;57 pm.sms
Scan No: 3524, Time: 29.128 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 29.128 min. Scan: 3524 Chan: 1 Ion: 23390 us RIC: 6371 BC
Pair Count: 64 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 150

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

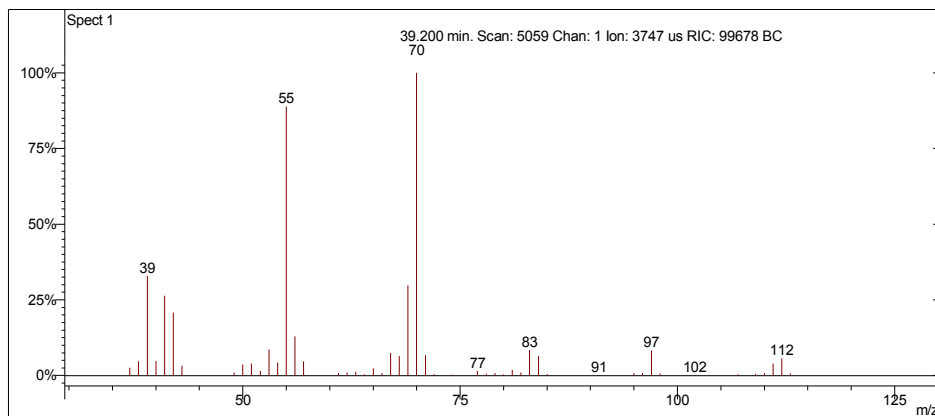
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
94	$[M]^{+} = C_7H_{10}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
79	$[M - 15]^{+} = C_6H_7^{+}$	Perda de metila
65	$[M - 29]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de etila.
Conclusão: a substância pode ser classificada como olefínico com 7 carbonos.		

(1Z,2E,4Z)-1,2,4-trimetilciclopentano

Amostra de Gasolina Comum

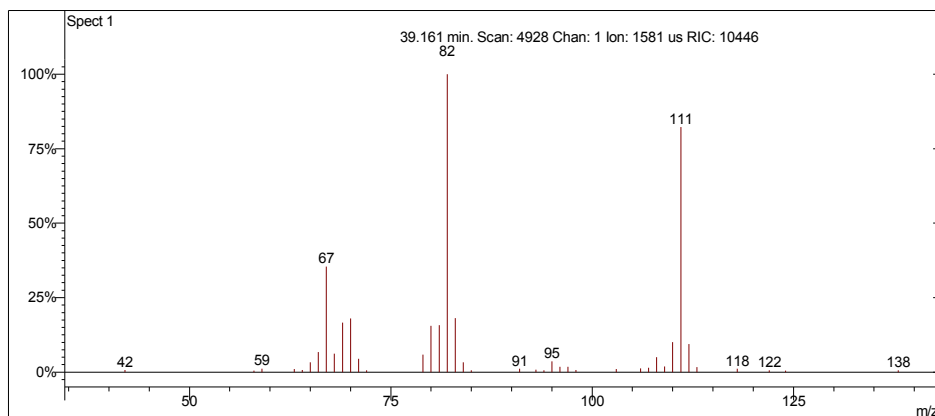
Scan 5059 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 5059, Time: 39.200 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 39.200 min. Scan: 5059 Chan: 1 Ion: 3747 us RIC: 99678 BC
Pair Count: 54 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 4928 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 4928, Time: 39.161 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 39.161 min. Scan: 4928 Chan: 1 Ion: 1581 us RIC: 10446
Pair Count: 40 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
112	$[M]^{+*} = C_8H_{16}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou cíclica com muitos substituintes.
97	$[M - 15]^+ = C_7H_{13}^+$	Perda de metila
83	$[M - 29]^+ = C_6H_{11}^+$	Perda de etila.
69	$C_5H_9^+$	Fragmentação do anel e perda de propila.
55	$C_4H_7^+$	Fragmentação do anel.

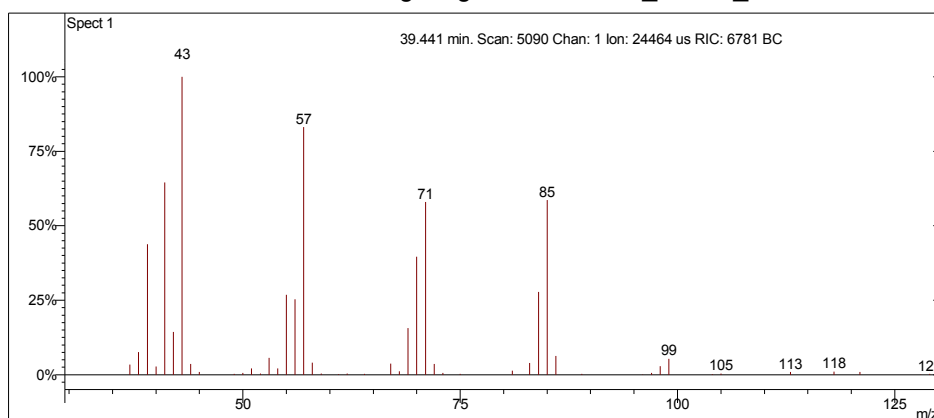
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^+ = 111$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+*} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_8H_{16} = C_8H_{15}^+ + CH_3CN$		
sem sinal		Metanol
Ionização química instável.		

3,3-dimetilexano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 5090 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 5090, Time: 39.441 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 39.441 min. Scan: 5090 Chan: 1 Ion: 24464 us RIC: 6781 BC
Pair Count: 69 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Quantidade desprezível. Ionização química instável.

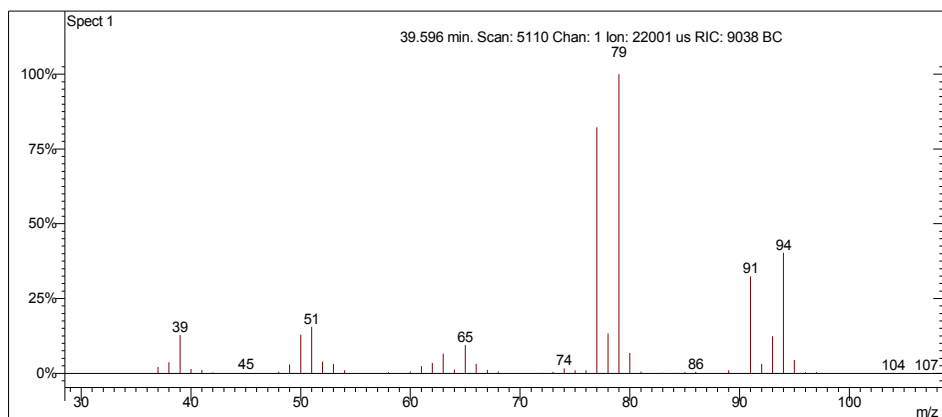
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
114 (ausente)	$[M]^{++} = C_8H_{18}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear.
99	$[M - 15]^+ = C_7H_{15}^+$	Perda de metila
85	$[M - 29]^+ = C_6H_{13}^+$	Perda de etila.
71	$C_5H_{11}^+$	Perda de propila.
57	$C_4H_9^+$	Perda de C_4H_9 .

5,5-dimetilciclopenta-1,3-dieno

Amostra de Gasolina Comum

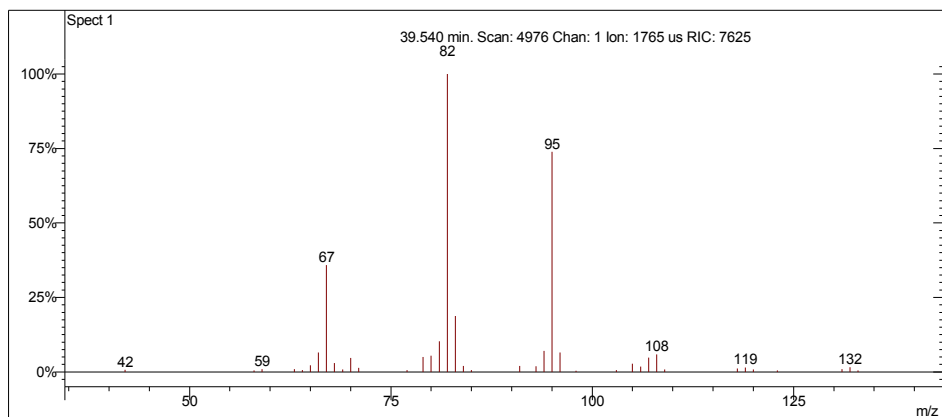
Scan 5110 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 5110, Time: 39.596 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 39.596 min. Scan: 5110 Chan: 1 Ion: 22001 us RIC: 9038 BC
Pair Count: 78 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

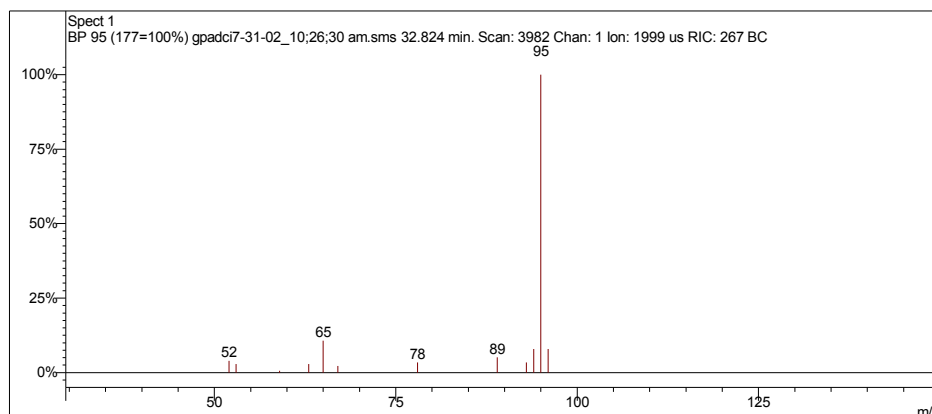
Scan 4976 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 4976, Time: 39.540 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 39.540 min. Scan: 4976 Chan: 1 Ion: 1765 us RIC: 7625
Pair Count: 41 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 3982 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 3982, Time: 32.824 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 32.824 min. Scan: 3982 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 267 BC
Pair Count: 12 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
94	$[M]^+ = C_7H_{10}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
79	$[M - 15]^+ = C_6H_7^+$	Perda de metila.
65	$[M - 29]^+ = C_5H_5^+$	Fragmentação do anel e perda de etila.

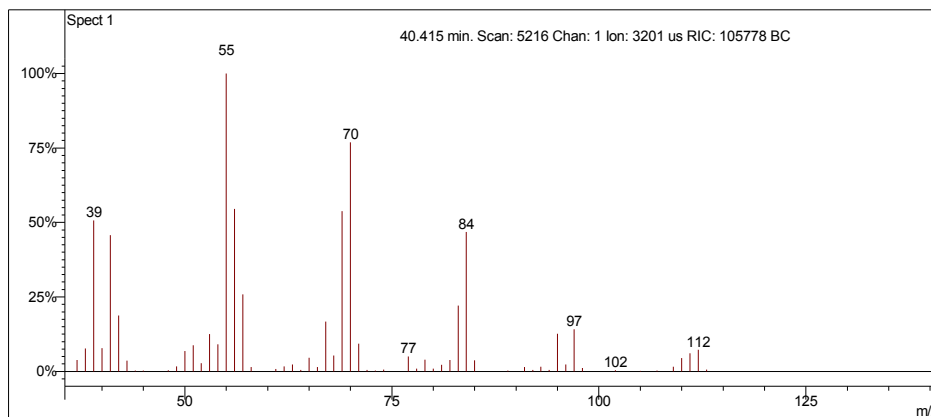
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 95$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_7H_{10} = C_7H_{11}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 95$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_7H_{10} = C_7H_{11}^+ + CH_3OH$		

(1E,2E,3Z)-1,2,3-trimetilciclopentano

Amostra de Gasolina Comum

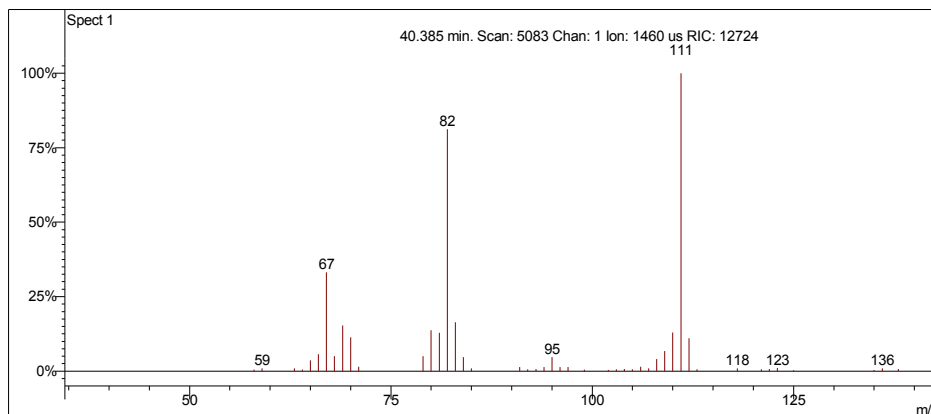
Scan 5216 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 5216, Time: 40.415 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 40.415 min. Scan: 5216 Chan: 1 Ion: 3201 us RIC: 105778 BC
Pair Count: 62 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 5083 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 5083, Time: 40.385 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 40.385 min. Scan: 5083 Chan: 1 Ion: 1460 us RIC: 12724
Pair Count: 46 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
112	$[M]^{+} = C_8H_{16}^{+}$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear.
97	$[M - 15]^{+} = C_7H_{13}^{+}$	Perda de metila
84	$[M - 28]^{+} = C_6H_{11}^{+}$	Perda de eteno.
69	$C_5H_9^{+}$	Perda de propila.
55	$C_4H_7^{+}$	Perda de butila.

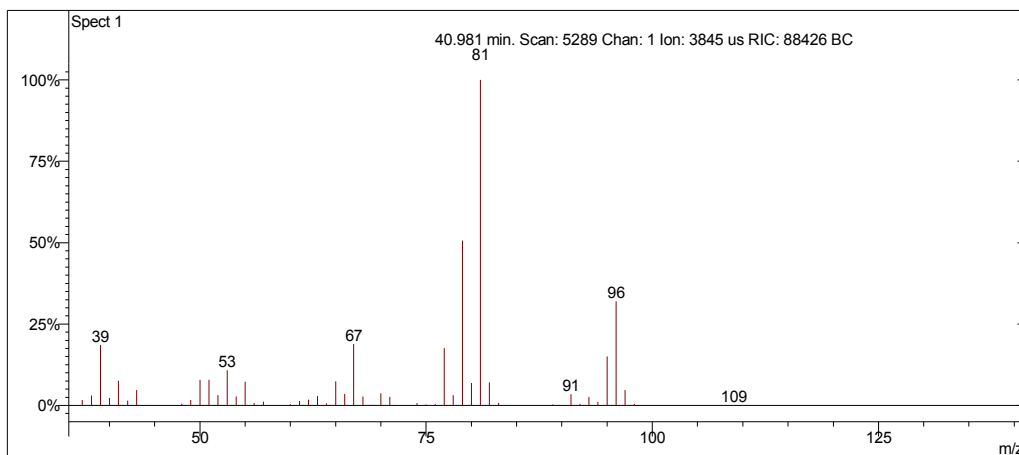
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^{+} = 111$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} = CH_2CN^{+} + \cdot H$ $CH_2CN^{+} + C_8H_{16} = C_8H_{15}^{+} + CH_3CN$		
sem sinal		Metanol
Ionização química instável.		

Desconhecido 9

Amostra de Gasolina Comum

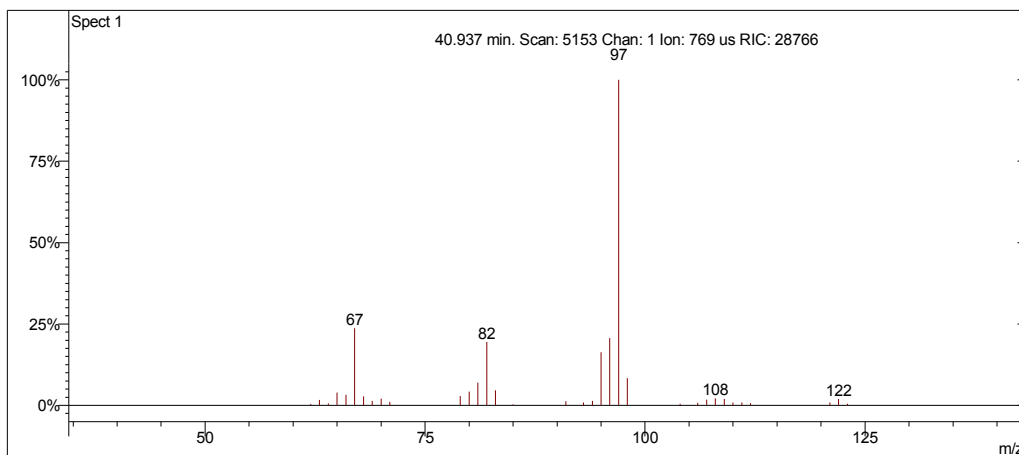
Scan 5289 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 5289, Time: 40.981 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 40.981 min. Scan: 5289 Chan: 1 Ion: 3845 us RIC: 88426 BC
Pair Count: 53 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

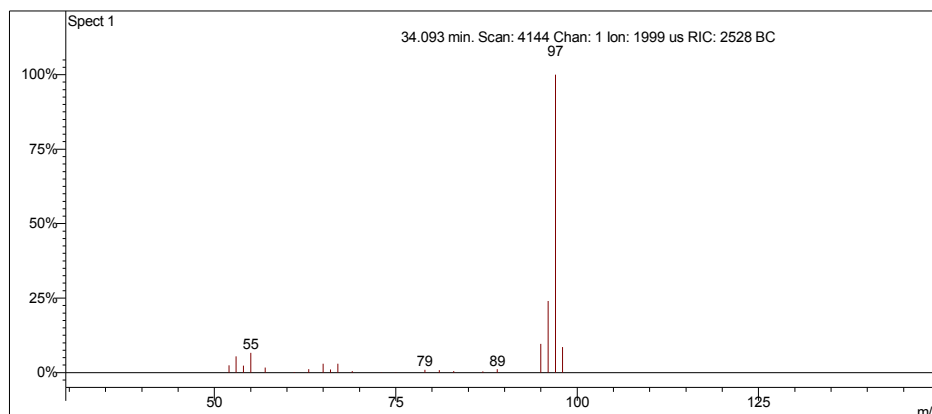
Scan 5153 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 5153, Time: 40.937 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 40.937 min. Scan: 5153 Chan: 1 Ion: 769 us RIC: 28766
Pair Count: 35 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 4144 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 4144, Time: 34.093 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 34.093 min. Scan: 4144 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 2528 BC
 Pair Count: 22 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
96	$[M]^{++} = C_7H_{12}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica. Confirmada por ionização química.
81	$[M - 15]^+ = C_6H_9^+$	Perda de metila. Pico base.
67	$C_5H_7^+$	Perda de etila.

Conclusão: olefina cíclica com 7 carbonos.

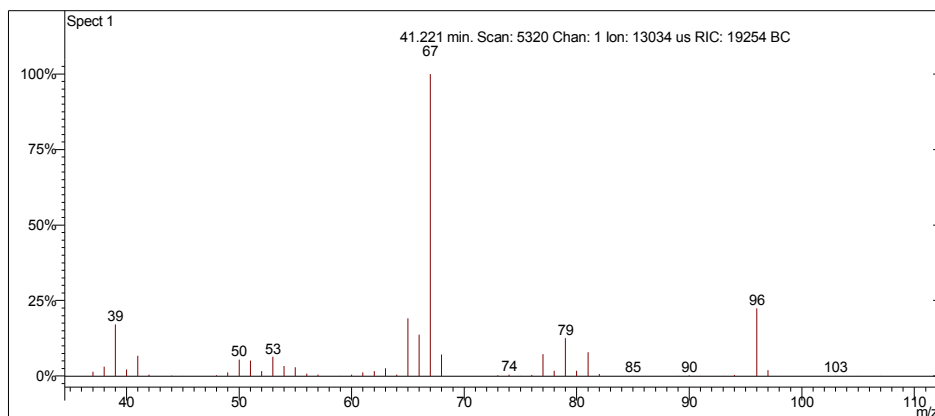
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 97$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_7H_{12} = C_7H_{13}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 97$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^+ + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_7H_{12} = C_7H_{13}^+ + CH_3OH$		

1-etilciclopenteno

Amostra de Gasolina Comum

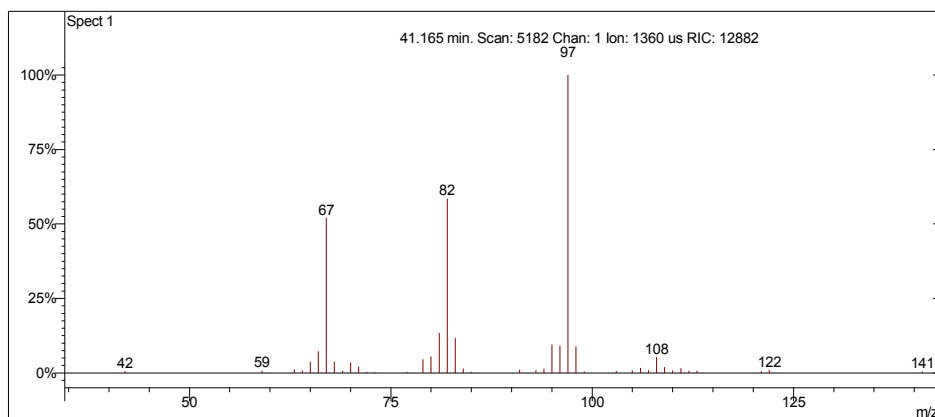
Scan 5320 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 5320, Time: 41.221 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 41.221 min. Scan: 5320 Chan: 1 Ion: 13034 us RIC: 19254 BC
Pair Count: 62 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

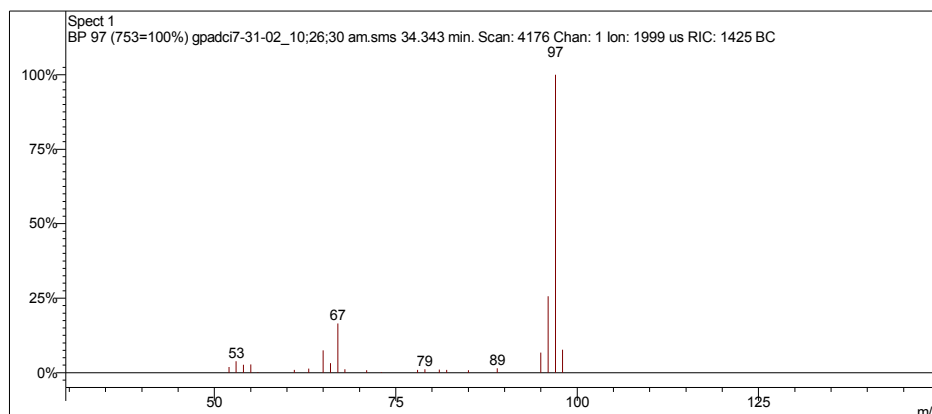
Scan 5182 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 5182, Time: 41.165 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 41.165 min. Scan: 5182 Chan: 1 Ion: 1360 us RIC: 12882
Pair Count: 44 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 4176 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 4176, Time: 34.343 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 34.343 min. Scan: 4176 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1425 BC
 Pair Count: 23 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
96	$[M]^+ = C_7H_{12}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
81	$[M - 15]^+ = C_6H_9^+$	Perda de metila.
67	$[M - 29]^+ = C_5H_7^+$	Perda de etila. Pico base.

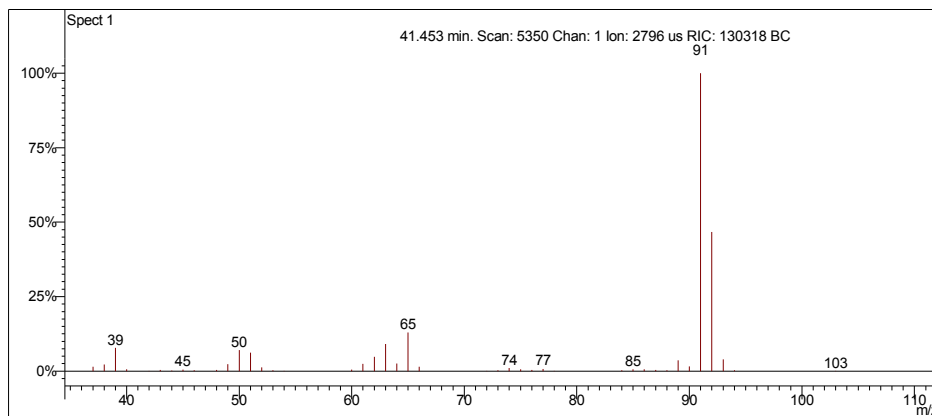
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 97$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^+ + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_7H_{12} = C_7H_{13}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 97$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^+ + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_7H_{12} = C_7H_{13}^+ + CH_3OH$		

Tolueno

Amostra de Gasolina Comum

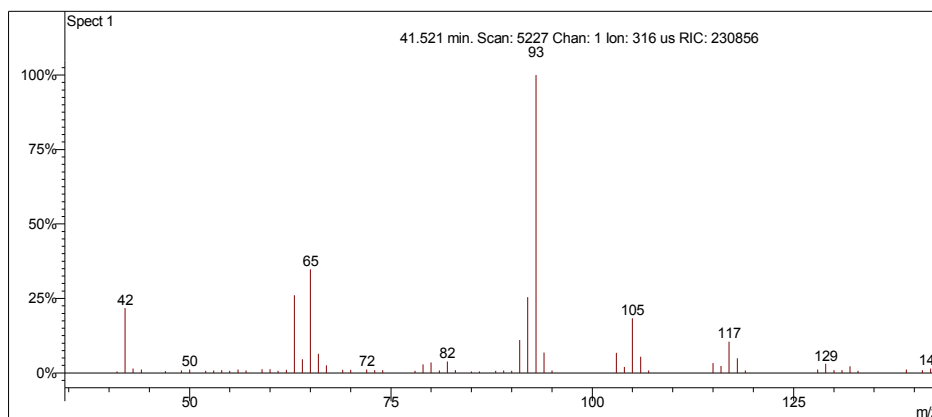
Scan 5350 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 5350, Time: 41.453 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 41.453 min. Scan: 5350 Chan: 1 Ion: 2796 us RIC: 130318 BC
Pair Count: 46 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

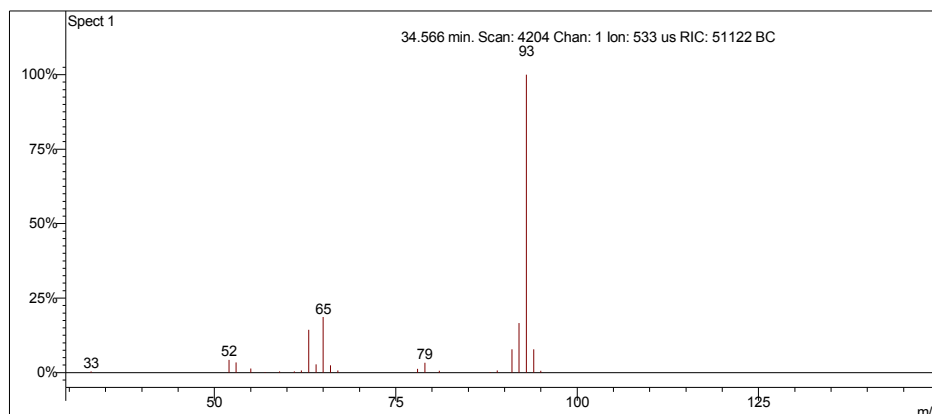
Scan 5227 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciact_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciact_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 5227, Time: 41.521 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 41.521 min. Scan: 5227 Chan: 1 Ion: 316 us RIC: 230856
Pair Count: 66 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 4204 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 4204, Time: 34.566 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 34.566 min. Scan: 4204 Chan: 1 Ion: 533 us RIC: 51122 BC
 Pair Count: 23 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 100

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
92	$[M]^{++} = C_7H_8^+$	Íon molecular com alta intensidade caracterizando molécula com ressonância ou cíclica.
91	$[M - 1]^+ = C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.

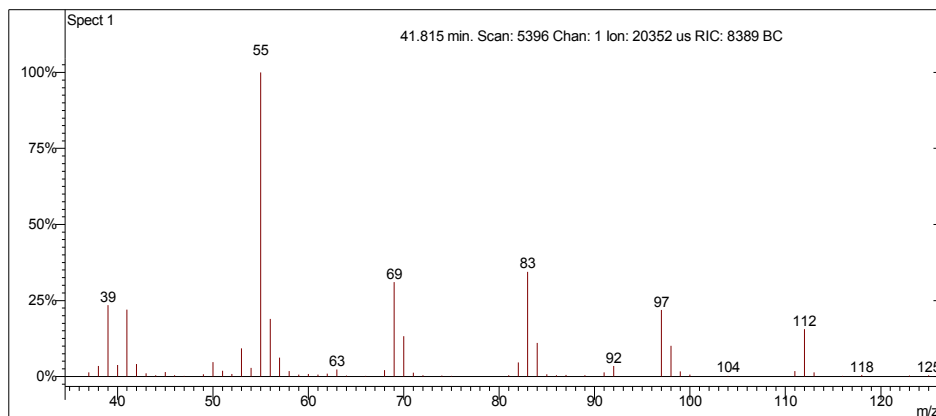
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 93$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_7H_8 = C_7H_9^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 93$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_7H_8 = C_7H_9^+ + CH_3OH$		

Desconhecido 10

Amostra de Gasolina Comum

Scan 5396 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms

Scan No: 5396, Time: 41.815 minutes

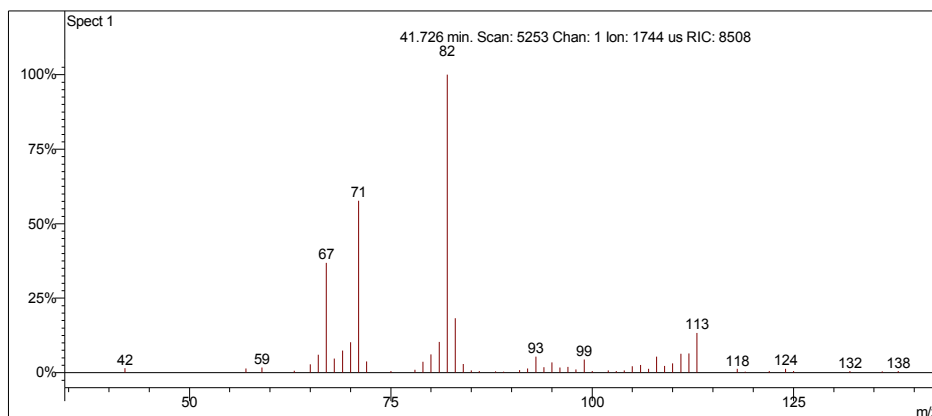
No averaging. Background corrected.

Comment: 41.815 min. Scan: 5396 Chan: 1 Ion: 20352 us RIC: 8389 BC

Pair Count: 73 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 5253 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms

Scan No: 5253, Time: 41.726 minutes

No averaging. Not background corrected.

Comment: 41.726 min. Scan: 5253 Chan: 1 Ion: 1744 us RIC: 8508

Pair Count: 57 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
112	$[M]^{+\bullet} = C_8H_{16}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear.
97	$[M - 15]^+ = C_7H_{13}^+$	Perda de metila
83	$[M - 29]^+ = C_6H_{11}^+$	Perda de etila.
69	$C_5H_9^+$	Perda de propila.
55	$C_4H_7^+$	Perda de butila.
Conclusão: a substância é um naftênico ramificado com 8 carbonos.		

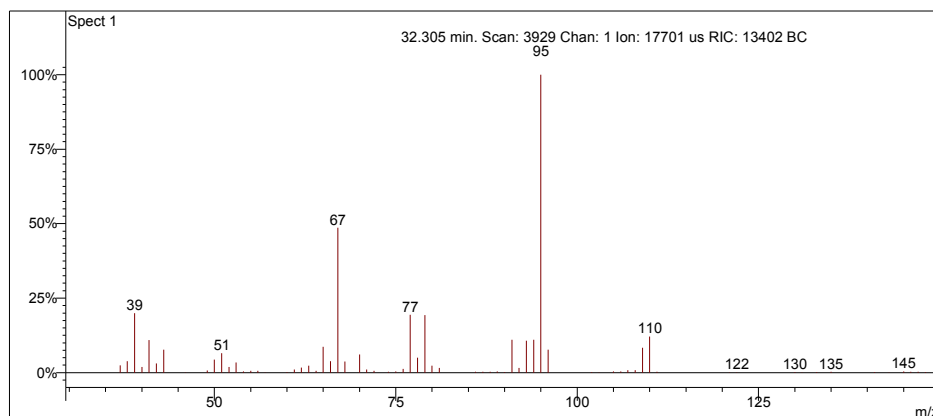
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 113$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+\bullet} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_8H_{16} = C_8H_{17}^+ + CH_3CN$		
sem sinal		Metanol
Ionização química instável.		

Desconhecido 11

Amostra de Gasolina Comum

Scan 3929 from c:\... \amostras\cgms\gas_aditivada_4-4-05_2;23;57 pm.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gas_aditivada_4-4-05_2;23;57 pm.sms
Scan No: 3929, Time: 32.305 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 32.305 min. Scan: 3929 Chan: 1 Ion: 17701 us RIC: 13402 BC
Pair Count: 70 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 150

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

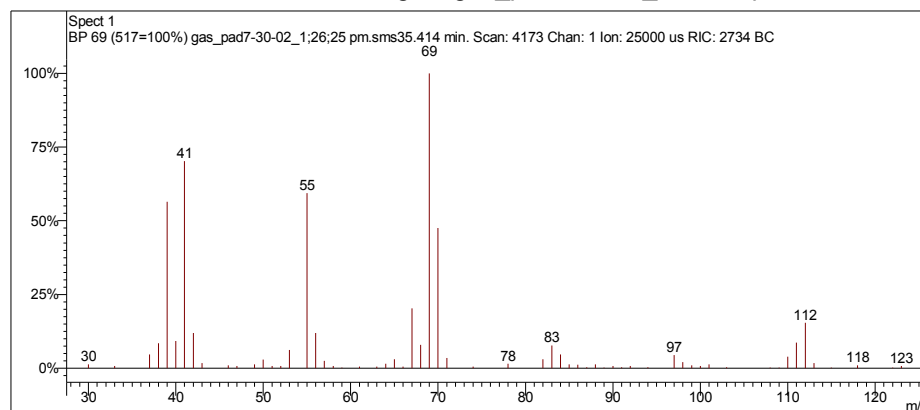
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
110	$[M]^+ = C_8H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
95	$[M - 15]^+ = C_7H_{11}^+$	Perda de metila. Pico base.
67	$[M - 43]^+ = C_5H_7^+$	Fragmentação do anel. Perda de propila.
Conclusão: a substância é um olefínico cíclico com 8 carbonos.		

1,1,2-trimetilciclopentano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 4173 from c:\... \amostras\cgms\gas_pad7-30-02_1;26;25 pm.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gas_pad7-30-02_1;26;25 pm.sms
Scan No: 4173, Time: 35.414 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 35.414 min. Scan: 4173 Chan: 1 Ion: 25000 us RIC: 2734 BC
Pair Count: 97 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Quantidade desprezível.

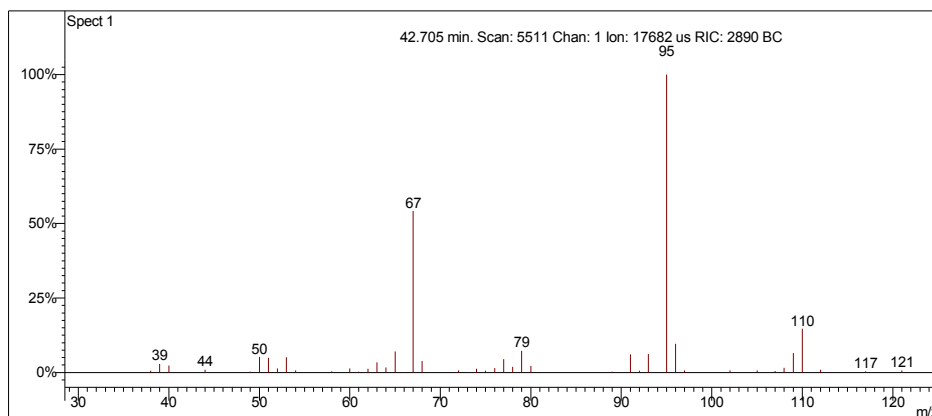
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
112	$[M]^+ = C_8H_{16}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
97	$[M - 15]^+ = C_7H_{13}^+$	Perda de metila.
83	$[M - 29]^+ = C_6H_{11}^+$	Perda de etila.
69	$C_5H_9^+$	Perda de propila.
55	$C_4H_7^+$	Perda de butila.

Desconhecido 12

Amostra de Gasolina Comum

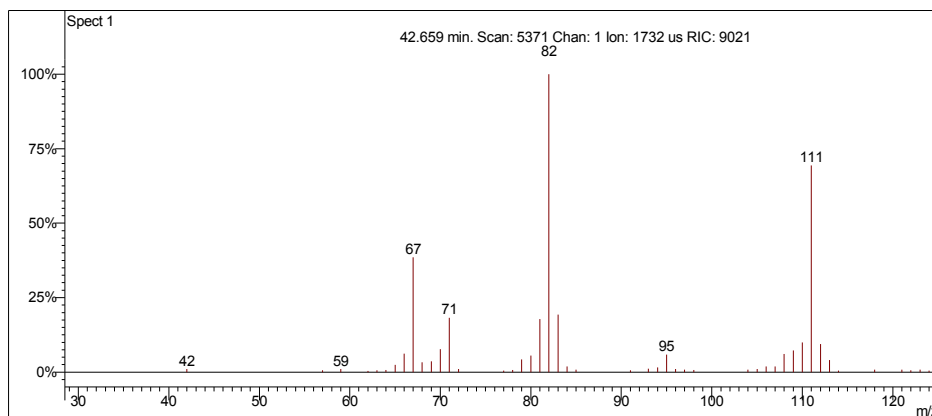
Scan 5511 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 5511, Time: 42.705 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 42.705 min. Scan: 5511 Chan: 1 Ion: 17682 us RIC: 2890 BC
Pair Count: 61 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

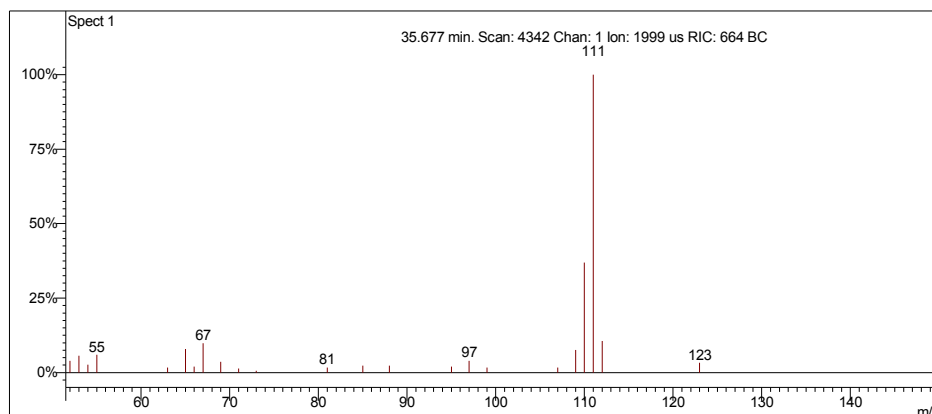
Scan 5371 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 5371, Time: 42.659 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 42.659 min. Scan: 5371 Chan: 1 Ion: 1732 us RIC: 9021
Pair Count: 52 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 4342 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 4342, Time: 35.677 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 35.677 min. Scan: 4342 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 664 BC
 Pair Count: 23 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
110	$[M]^+ = C_8H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
95	$[M - 15]^+ = C_7H_{11}^+$	Perda de metila. Pico base.
67	$[M - 43]^+ = C_5H_7^+$	Fragmentação do anel. Perda de propila.

Conclusão: a substância é um olefínico cíclico com 8 carbonos.

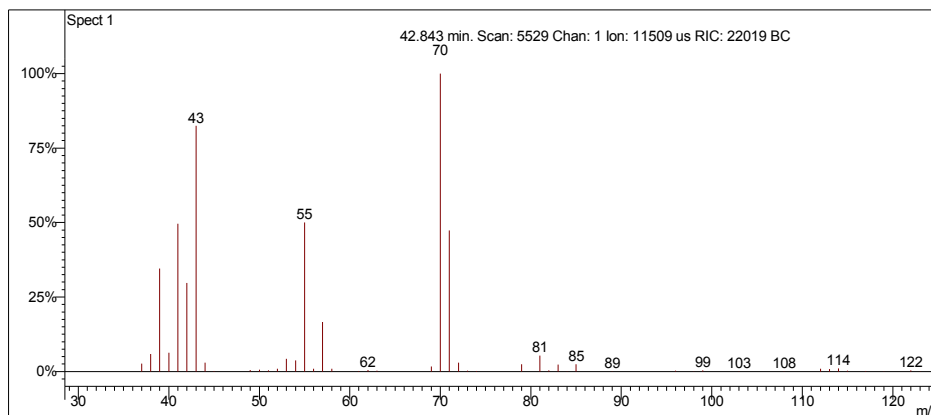
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 111$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+\bullet} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \bullet CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_8H_{14} = C_8H_{15}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 111$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{+\bullet} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \bullet CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_8H_{14} = C_8H_{15}^+ + CH_3OH$		

2,3-dimetilexano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 5529 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 5529, Time: 42.843 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 42.843 min. Scan: 5529 Chan: 1 Ion: 11509 us RIC: 22019 BC
Pair Count: 60 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

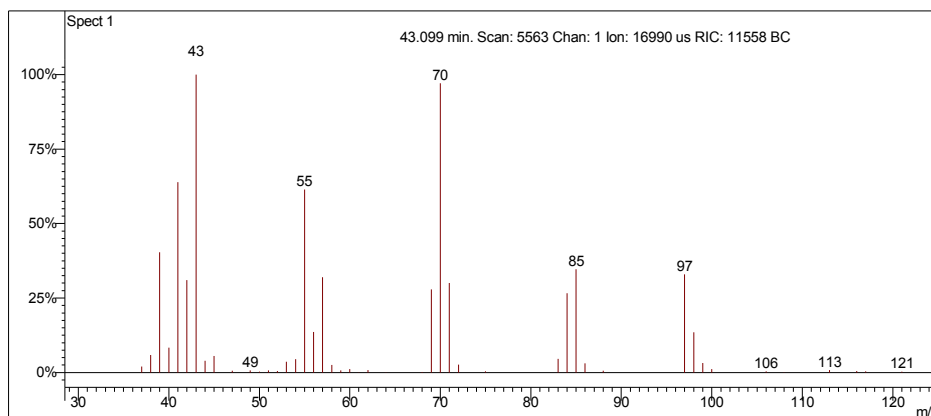
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
114 (ausente)	$[M]^+ = C_8H_{18}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
99	$[M - 15]^+ = C_7H_{15}^+$	Perda de metila
85	$[M - 29]^+ = C_6H_{13}^+$	Perda de etila.
70	$C_5H_{10}^+$	Perda de propano.
55	$C_4H_7^+$	Fragmentação alílica com rearranjo de hidrogênio.

3-etil-2-metilpentano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 5563 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 5563, Time: 43.099 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 43.099 min. Scan: 5563 Chan: 1 Ion: 16990 us RIC: 11558 BC
Pair Count: 60 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Inonização química instável. Quantidade desprezível.

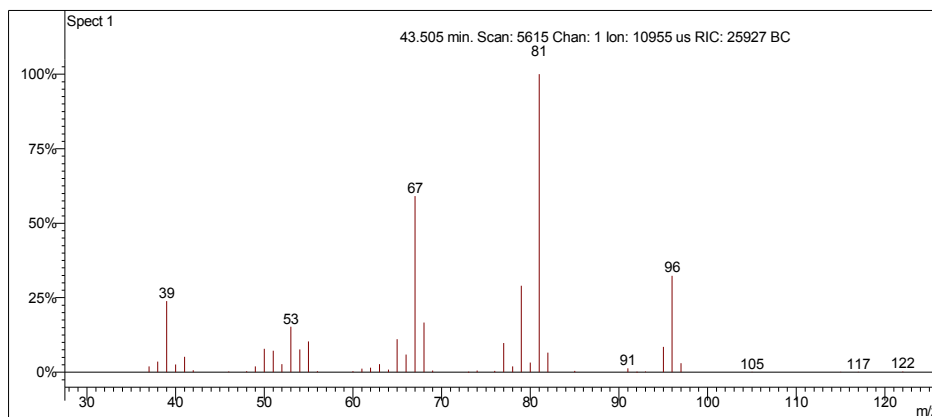
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
114 (ausente)	$[M]^+ = C_8H_{18}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
99	$[M - 15]^+ = C_7H_{15}^+$	Perda de metila
85	$[M - 29]^+ = C_6H_{13}^+$	Perda de etila.
70	$C_5H_{10}^+$	Perda de propano.
57	$C_4H_9^+$	Perda de butila.

Desconhecido 13

Amostra de Gasolina Comum

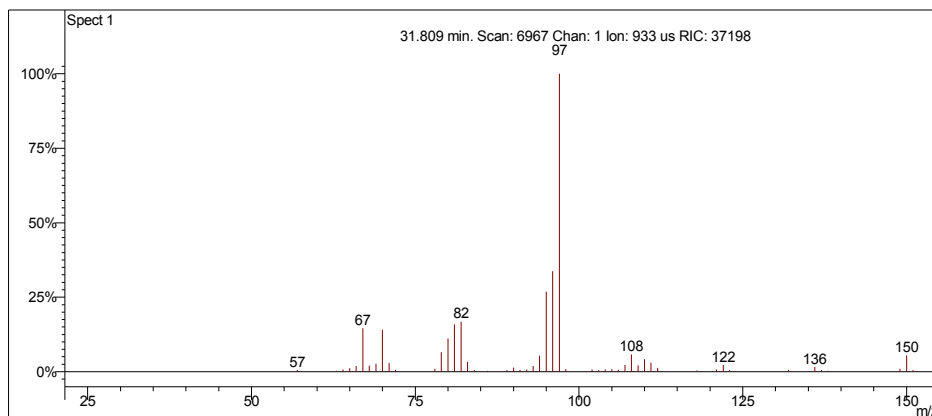
Scan 5615 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 5615, Time: 43.505 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 43.505 min. Scan: 5615 Chan: 1 Ion: 10955 us RIC: 25927 BC
Pair Count: 51 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

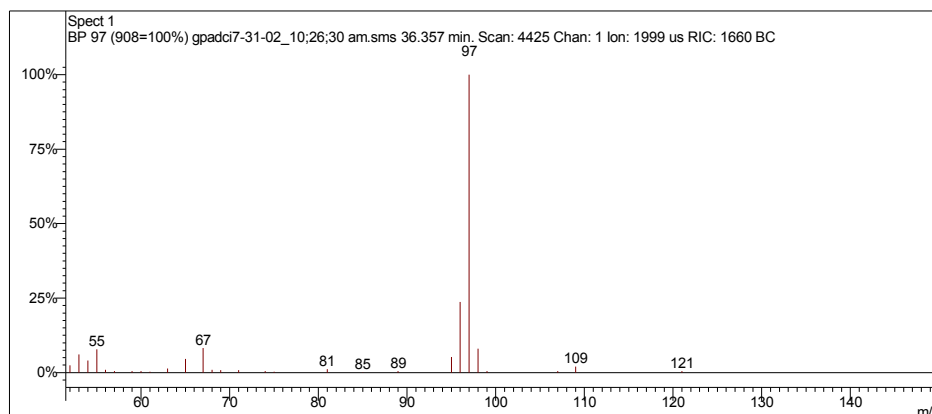
Scan 6967 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms
Scan No: 6967, Time: 31.809 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 31.809 min. Scan: 6967 Chan: 1 Ion: 933 us RIC: 37198
Pair Count: 55 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 4425 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 4425, Time: 36.357 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 36.357 min. Scan: 4425 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1660 BC
Pair Count: 28 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
96	$[M]^+ = C_7H_{12}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
81	$[M - 15]^+ = C_6H_9^+$	Perda de metila. Pico base.
67	$C_5H_7^+$	Perda de etila.

Conclusão: a substância é um olefínico ramificado com 7 carbonos.

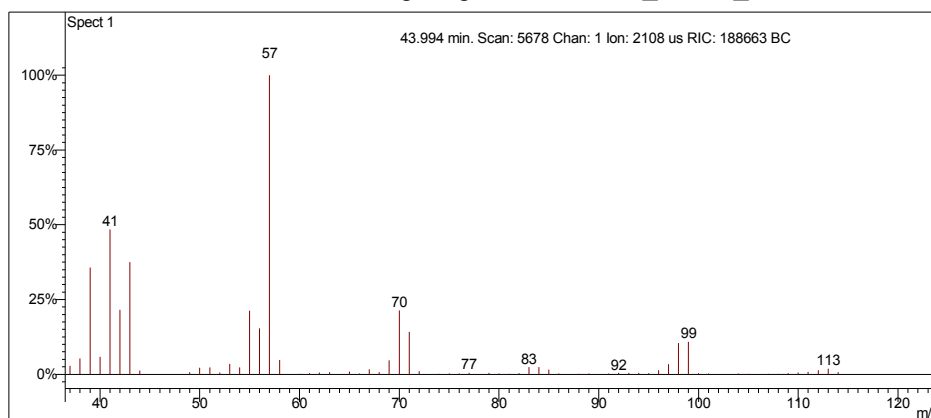
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 97$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+\bullet} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \bullet CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_7H_{12}^+ = C_7H_{13}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 97$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{+\bullet} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \bullet CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_7H_{12}^+ = C_7H_{13}^+ + CH_3OH$		

2-metileptano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 5678 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 5678, Time: 43.994 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 43.994 min. Scan: 5678 Chan: 1 Ion: 2108 us RIC: 188663 BC
Pair Count: 66 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

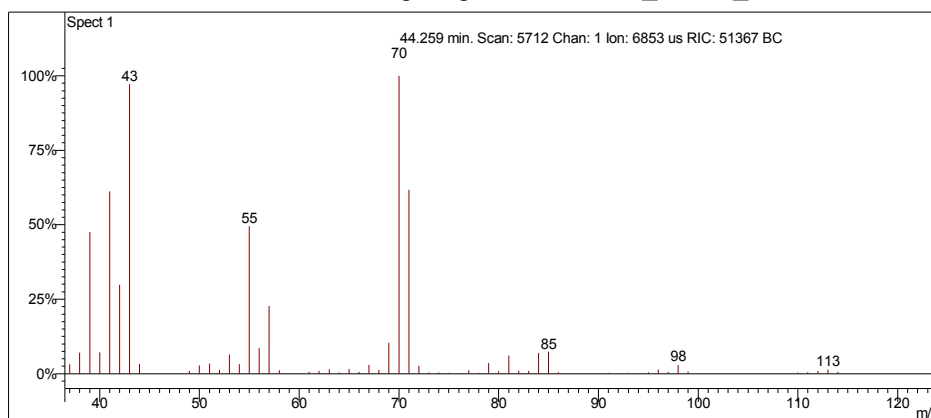
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
114 (ausente)	$[M]^+ = C_8H_{18}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
99	$[M - 15]^+ = C_7H_{15}^+$	Perda de metila
85	$[M - 29]^+ = C_6H_{13}^+$	Perda de etila.
70	$C_5H_{10}^+$	Perda de propano.
57	$C_4H_9^+$	Perda de butila.

4-metileptano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 5712 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 5712, Time: 44.259 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 44.259 min. Scan: 5712 Chan: 1 Ion: 6853 us RIC: 51367 BC
Pair Count: 61 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

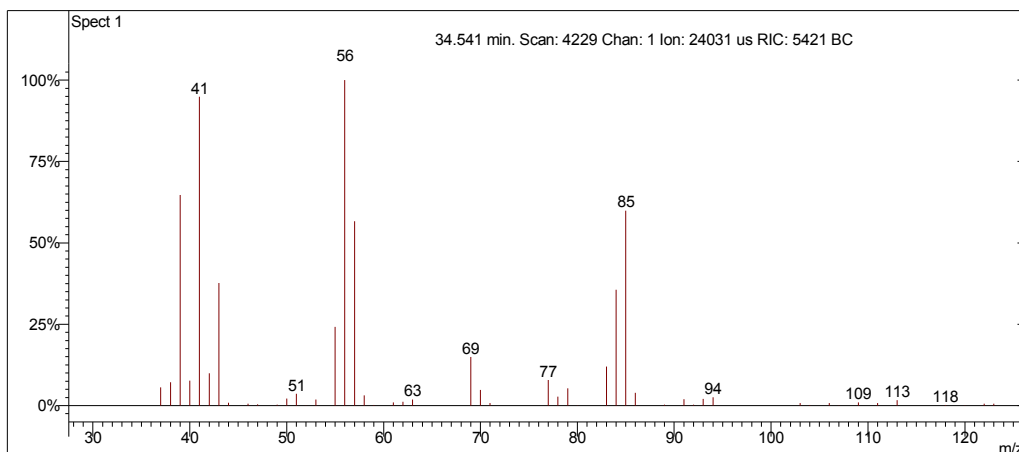
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
114 (ausente)	$[M]^+ = C_8H_{18}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
85	$[M - 29]^+ = C_6H_{13}^+$	Perda de etila.
70	$C_5H_{10}^+$	Perda de propano.
57	$C_4H_9^+$	Perda de butila.

3,4-dimetilexano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 4229 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
 Scan No: 4229, Time: 34.541 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 34.541 min. Scan: 4229 Chan: 1 Ion: 24031 us RIC: 5421 BC
 Pair Count: 60 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 150

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Quantidade desprezível.

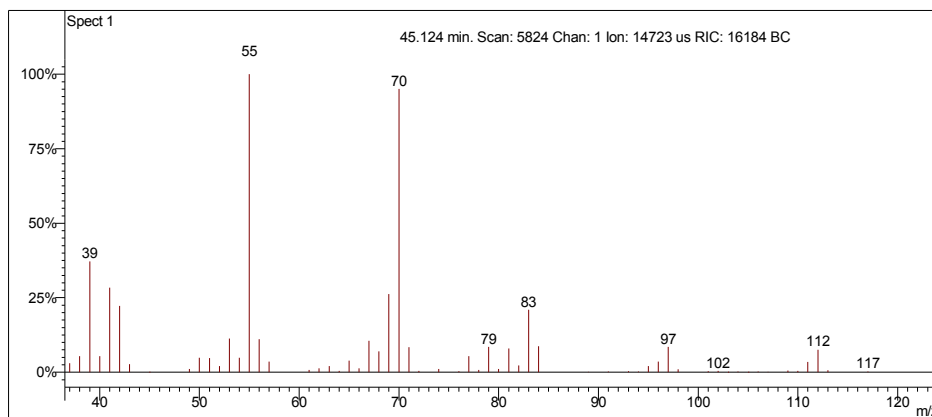
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
114 (ausente)	$[M]^{+} = C_8H_{18}^{+}$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
85	$[M - 29]^{+} = C_6H_{13}^{+}$	Perda de etila.
69	$C_5H_9^{+}$	Perda de propano com rearranjo de hidrogênio.
56	$C_4H_8^{+}$	Perda de butano.

Desconhecido 14

Amostra de Gasolina Comum

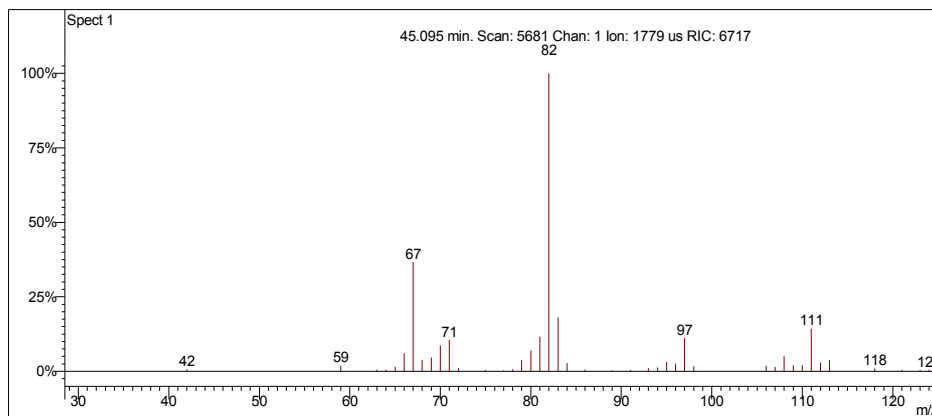
Scan 5824 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 5824, Time: 45.124 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 45.124 min. Scan: 5824 Chan: 1 Ion: 14723 us RIC: 16184 BC
Pair Count: 72 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 5681 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 5681, Time: 45.095 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 45.095 min. Scan: 5681 Chan: 1 Ion: 1779 us RIC: 6717
Pair Count: 44 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
112	$[M]^+ = C_8H_{16}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
97	$[M - 15]^+ = C_7H_{13}^+$	Perda de metila
84	$[M - 28]^+ = C_6H_{11}^+$	Perda de eteno.
70	$C_5H_{10}^+$	Fragmentação do anel.
55	$C_4H_7^+$	Perda de butila.
Conclusão: a substância é um naftênico ramificado com 8 carbonos.		

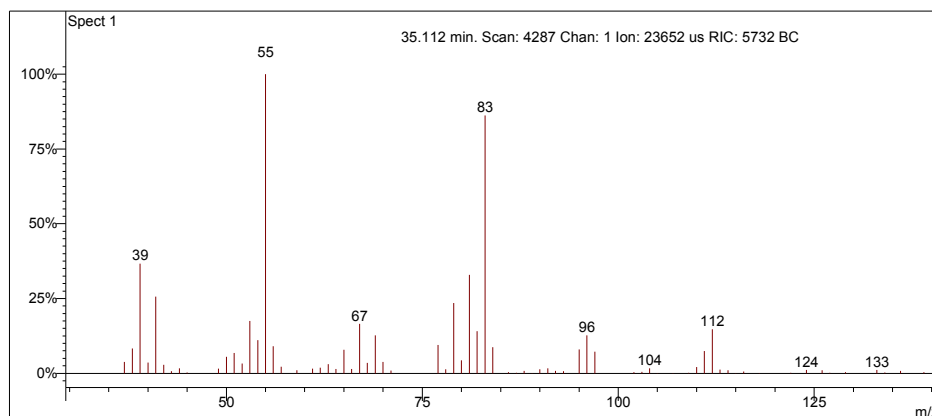
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^+ = 111$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_8H_{16} = C_8H_{15}^+ + CH_3CN$		
Sem sinal	.	Metanol
Quantidade desprezível.		

Desconhecido 15

Amostra de Gasolina Comum

Scan 4287 from c:\... \amostras\cgms\gas_aditivada_4-4-05_2;23;57 pm.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gas_aditivada_4-4-05_2;23;57 pm.sms
Scan No: 4287, Time: 35.112 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 35.112 min. Scan: 4287 Chan: 1 Ion: 23652 us RIC: 5732 BC
Pair Count: 116 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

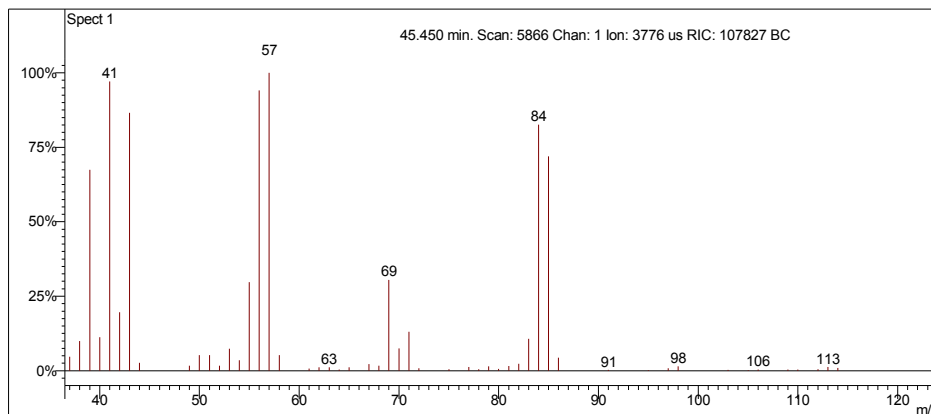
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
112	$[M]^+ = C_8H_{16}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
96	$[M - 16]^+ = C_7H_{12}^+$	Perda de metila com rearranjo de hidrogênio.
83	$[M - 29]^+ = C_6H_{11}^+$	Perda de etila.
55	$C_4H_7^+$	Perda de butila.
Conclusão: a substância é um naftênico com 8 carbonos.		

3-metileptano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 5866 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 5866, Time: 45.450 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 45.450 min. Scan: 5866 Chan: 1 Ion: 3776 us RIC: 107827 BC
Pair Count: 53 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

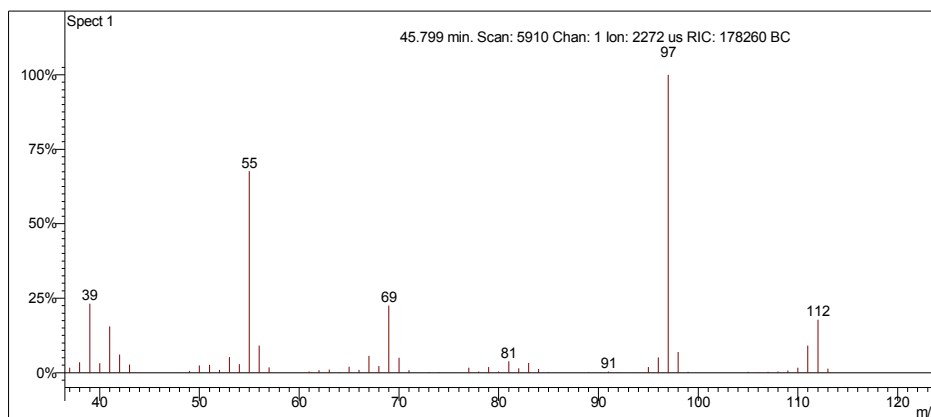
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
114 (ausente)	$[M]^{+} = C_8H_{18}^{+}$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
85	$[M - 29]^{+} = C_6H_{13}^{+}$	Perda de etila.
69	$C_5H_9^{+}$	Perda de propano com rearranjo de hidrogênio.
57	$C_4H_9^{+}$	Perda de butila.

(Z)-1,3-dimetilcicloexano

Amostra de Gasolina Comum

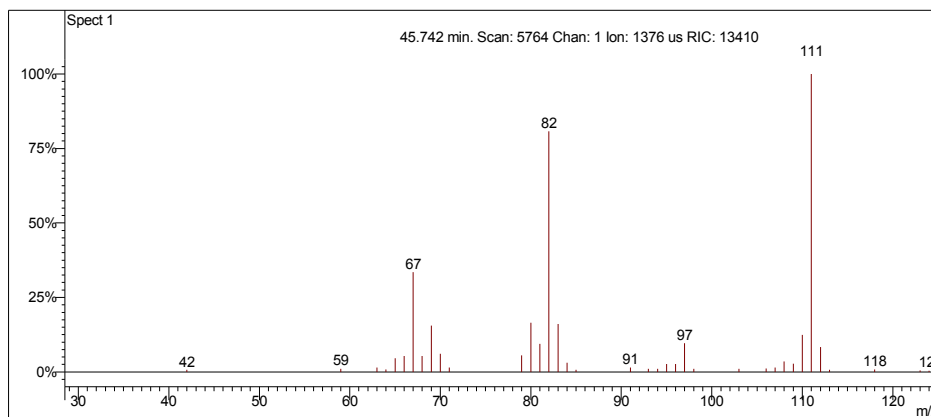
Scan 5910 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 5910, Time: 45.799 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 45.799 min. Scan: 5910 Chan: 1 Ion: 2272 us RIC: 178260 BC
Pair Count: 56 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

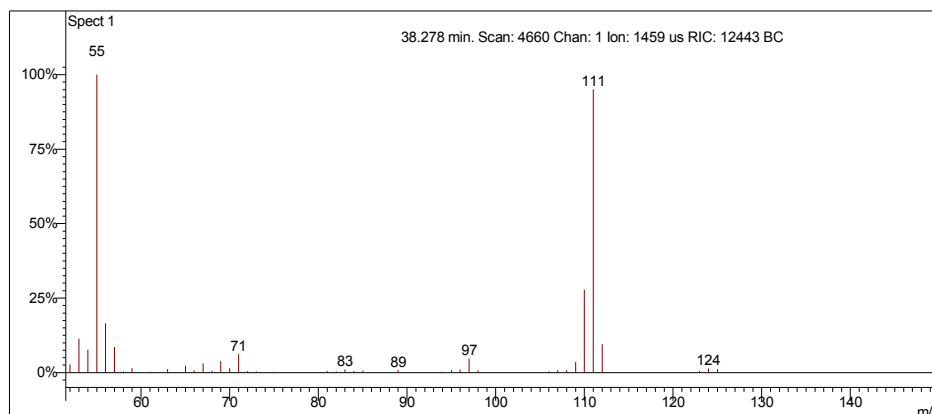
Scan 5764 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 5764, Time: 45.742 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 45.742 min. Scan: 5764 Chan: 1 Ion: 1376 us RIC: 13410
Pair Count: 40 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 4660 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 4660, Time: 38.278 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 38.278 min. Scan: 4660 Chan: 1 Ion: 1459 us RIC: 12443 BC
 Pair Count: 41 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
112	$[M]^{++} = C_8H_{16}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula cíclica.
97	$[M - 15]^+ = C_7H_{13}^+$	Perda de metila
83	$[M - 29]^+ = C_6H_{10}^+$	Perda de etila.
69	$C_5H_9^+$	Perda de propila.
55	$C_4H_7^+$	Perda de butila.

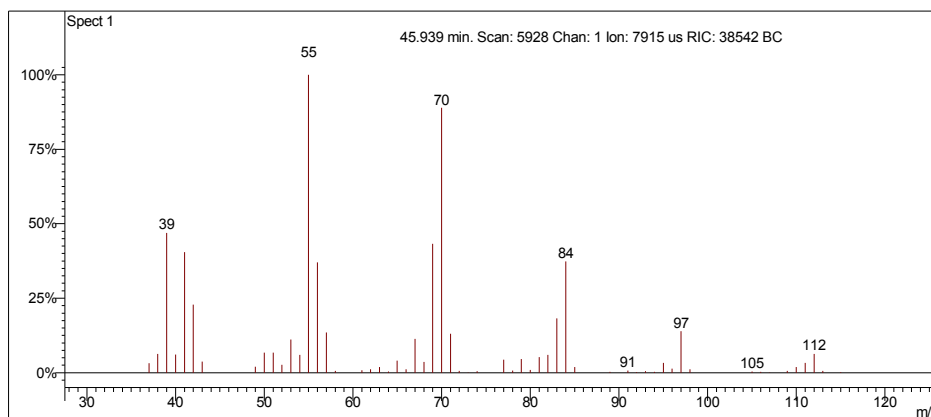
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^+ = 111$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_8H_{16} = C_8H_{15}^+ + CH_3CN$		
$[M-1]^+ = 111$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{++} = CH_2OH^+ + \cdot H$ $CH_2OH^+ + C_8H_{16} = C_8H_{15}^+ + CH_3OH$		

(1Z,2Z,4E)-1,2,4-trimetilciclopentano

Amostra de Gasolina Comum

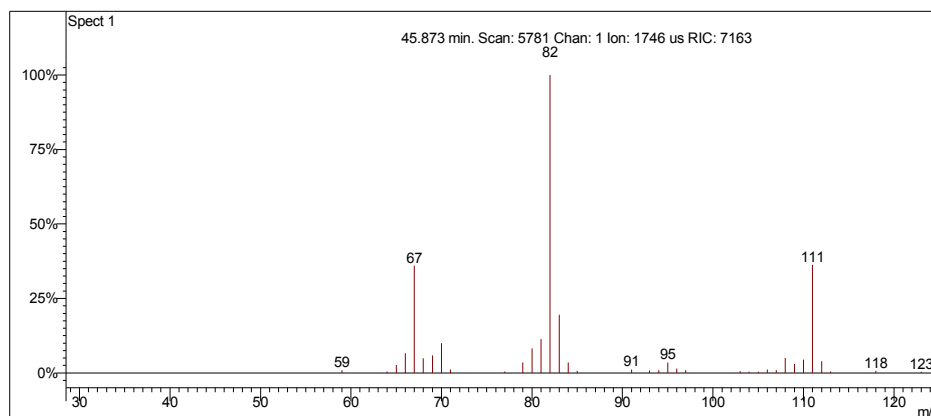
Scan 5928 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 5928, Time: 45.939 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 45.939 min. Scan: 5928 Chan: 1 Ion: 7915 us RIC: 38542 BC
Pair Count: 65 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

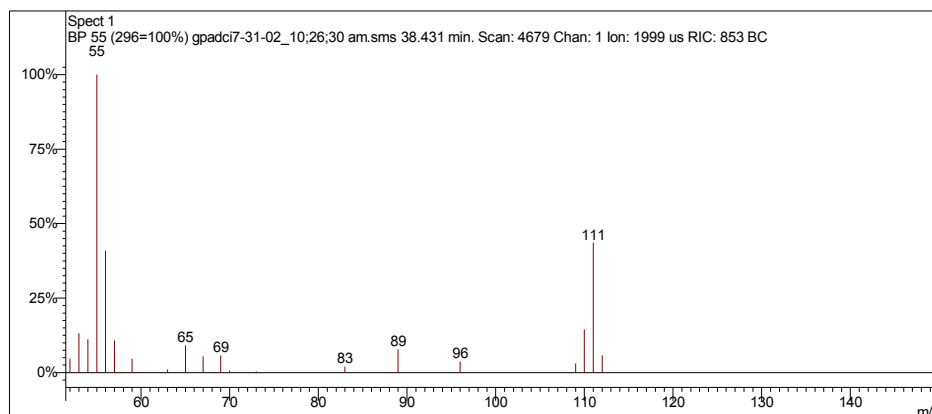
Scan 5781 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 5781, Time: 45.873 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 45.873 min. Scan: 5781 Chan: 1 Ion: 1746 us RIC: 7163
Pair Count: 37 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 4679 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 4679, Time: 38.431 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 38.431 min. Scan: 4679 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 853 BC
Pair Count: 20 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
112	$[M]^{+} = C_8H_{16}^{+}$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
97	$[M - 15]^{+} = C_7H_{13}^{+}$	Perda de metila.
83	$[M - 28]^{+} = C_6H_{10}^{+}$	Perda de etila.
69	$C_5H_9^{+}$	Perda de propila.
55	$C_4H_7^{+}$	Perda de butila.

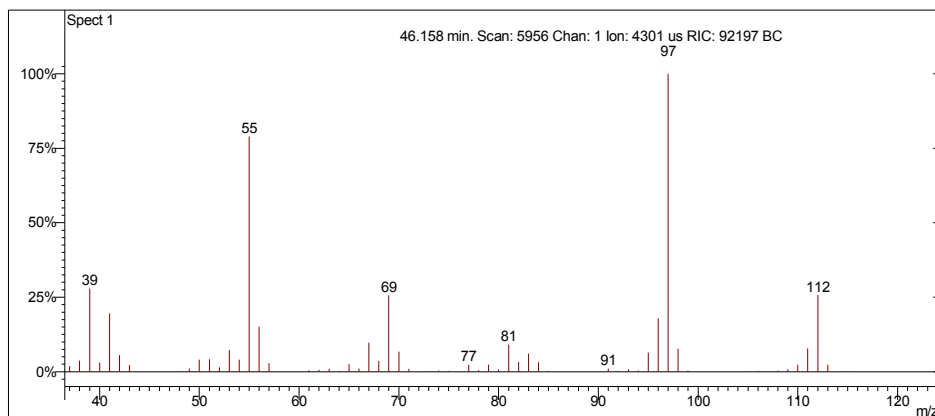
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^{+} = 111$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} = CH_2CN^{+} + \cdot H$ $CH_2CN^{+} + C_8H_{16} = C_8H_{15}^{+} + CH_3CN$		
$[M-1]^{+} = 111$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{+} = CH_2OH^{+} + \cdot H$ $CH_2OH^{+} + C_8H_{16} = C_8H_{15}^{+} + CH_3OH$		

(E)-1,4-dimetilcicloexano

Amostra de Gasolina Comum

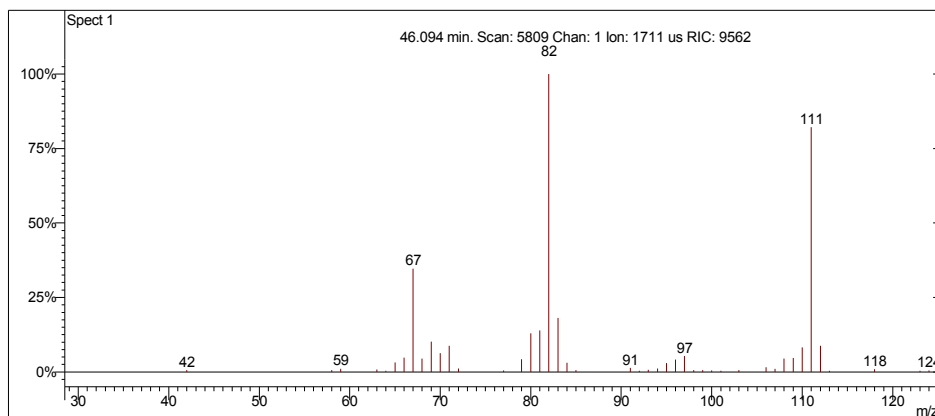
Scan 5956 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 5956, Time: 46.158 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 46.158 min. Scan: 5956 Chan: 1 Ion: 4301 us RIC: 92197 BC
Pair Count: 61 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

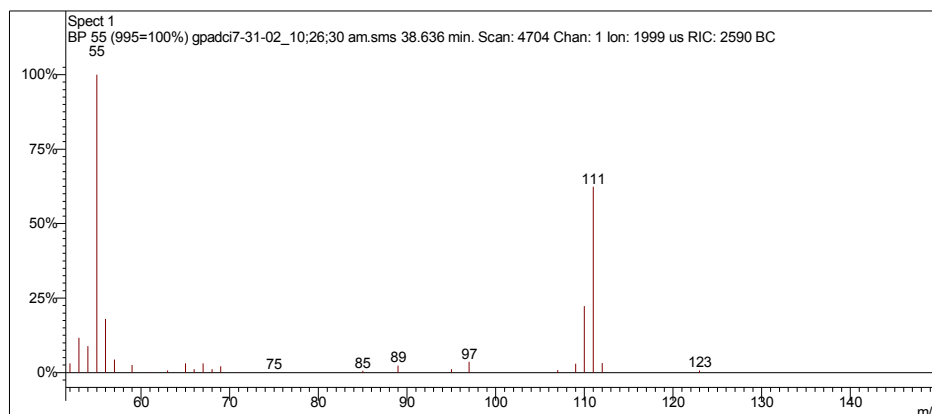
Scan 5809 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciact_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciact_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 5809, Time: 46.094 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 46.094 min. Scan: 5809 Chan: 1 Ion: 1711 us RIC: 9562
Pair Count: 47 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 4704 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 4704, Time: 38.636 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 38.636 min. Scan: 4704 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 2590 BC
Pair Count: 26 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
112	$[M]^{++} = C_8H_{16}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula cíclica.
97	$[M - 15]^+ = C_7H_{13}^+$	Perda de metila
83	$[M - 29]^+ = C_6H_{10}^+$	Perda de etila.
69	$C_5H_9^+$	Perda de propila.
55	$C_4H_7^+$	Perda de butila.

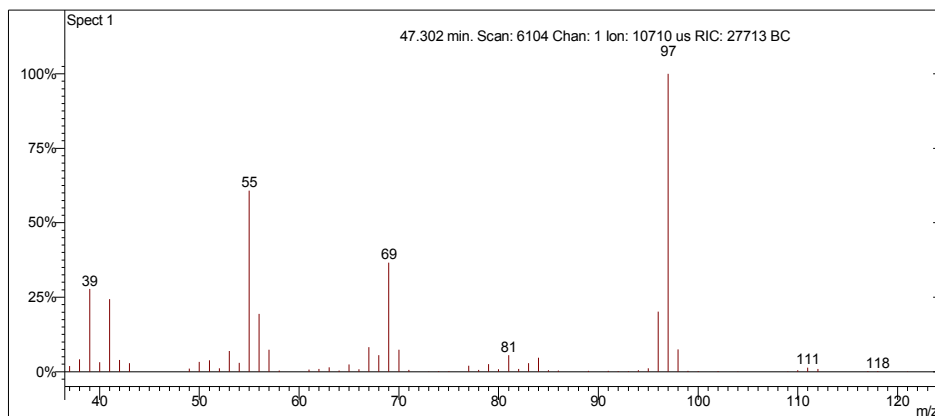
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^+ = 111$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_8H_{16} = C_8H_{15}^+ + CH_3CN$		
$[M-1]^+ = 111$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{++} = CH_2OH^+ + \cdot H$ $CH_2OH^+ + C_8H_{16} = C_8H_{15}^+ + CH_3OH$		

1,1-dimetilcicloexano

Amostra de Gasolina Comum

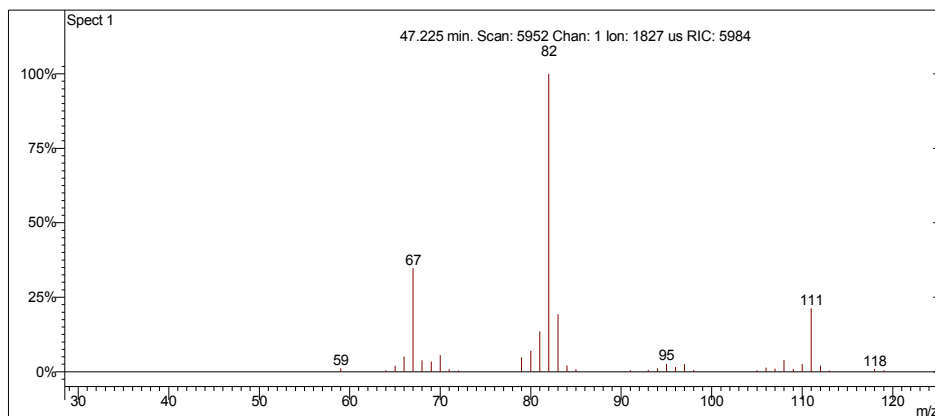
Scan 6104 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 6104, Time: 47.302 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 47.302 min. Scan: 6104 Chan: 1 Ion: 10710 us RIC: 27713 BC
Pair Count: 69 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

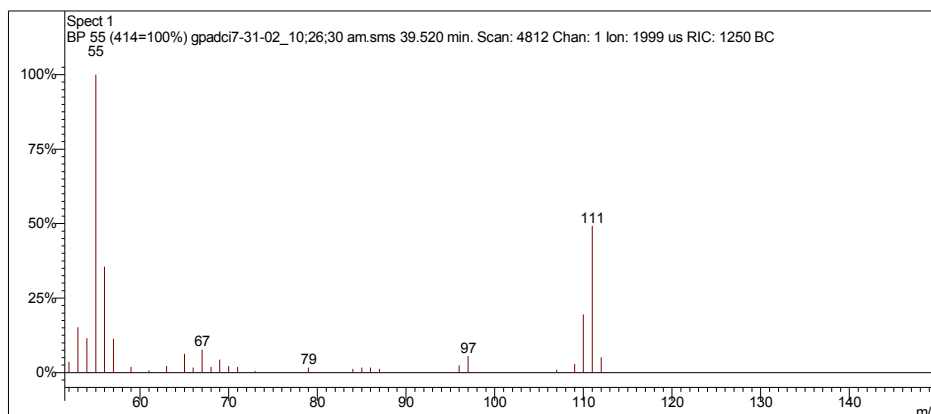
Scan 5952 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 5952, Time: 47.225 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 47.225 min. Scan: 5952 Chan: 1 Ion: 1827 us RIC: 5984
Pair Count: 35 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 4812 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 4812, Time: 39.520 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 39.520 min. Scan: 4812 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1250 BC
Pair Count: 29 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
112	$[M]^{++} = C_8H_{16}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula cíclica.
97	$[M - 15]^+ = C_7H_{13}^+$	Perda de metila
83	$[M - 29]^+ = C_6H_{10}^+$	Perda de etila.
69	$C_5H_9^+$	Perda de propila.
55	$C_4H_7^+$	Perda de butila.

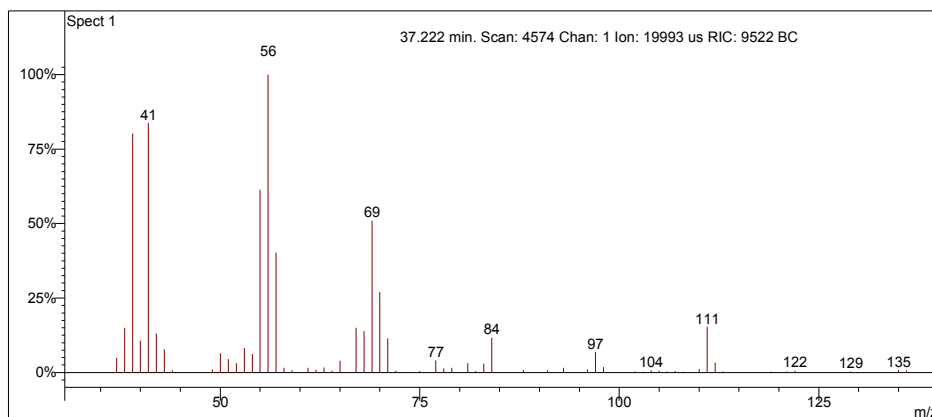
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^+ = 111$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_8H_{16} = C_8H_{15}^+ + CH_3CN$		
$[M-1]^+ = 111$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{++} = CH_2OH^+ + \cdot H$ $CH_2OH^+ + C_8H_{16} = C_8H_{15}^+ + CH_3OH$		

Desconhecido 16

Amostra de Gasolina Comum

Scan 4574 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 4574, Time: 37.222 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 37.222 min. Scan: 4574 Chan: 1 Ion: 19993 us RIC: 9522 BC
Pair Count: 105 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

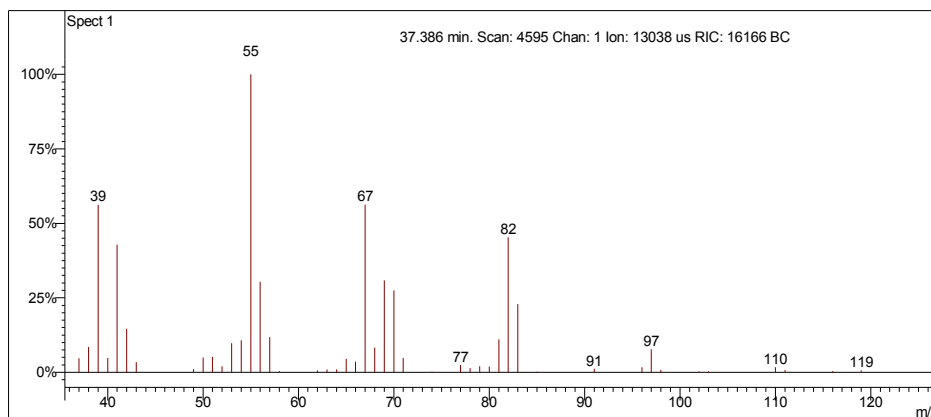
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
112 (ausente)	$[M]^+ = C_8H_{16}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula cíclica.
97	$[M - 15]^+ = C_7H_{13}^+$	Perda de metila.
84	$[M - 28]^+ = C_6H_{10}^+$	Perda de etano.
69	$C_5H_9^+$	Perda de propila.
56	$C_4H_8^+$	Perda de butano.
Conclusão: a substância é um naftênico ramificado com 8 carbonos.		

Desconhecido 17

Amostra de Gasolina Comum

Scan 4595 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 4595, Time: 37.386 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 37.386 min. Scan: 4595 Chan: 1 Ion: 13038 us RIC: 16166 BC
Pair Count: 79 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

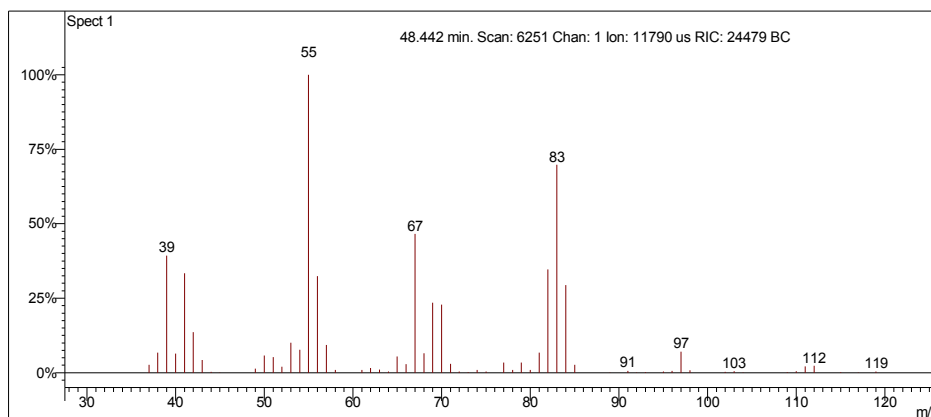
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
112 (ausente)	$[M]^+ = C_8H_{16}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula cíclica.
97	$[M - 15]^+ = C_7H_{13}^+$	Perda de metila.
83	$[M - 29]^+ = C_6H_{10}^+$	Perda de etila.
69	$C_5H_9^+$	Perda de propila.
55	$C_4H_7^+$	Perda de butila.
Conclusão: a substância é um naftênico ramificado com 8 carbonos.		

(E)-1-etil-3-metilciclopentano

Amostra de Gasolina Comum

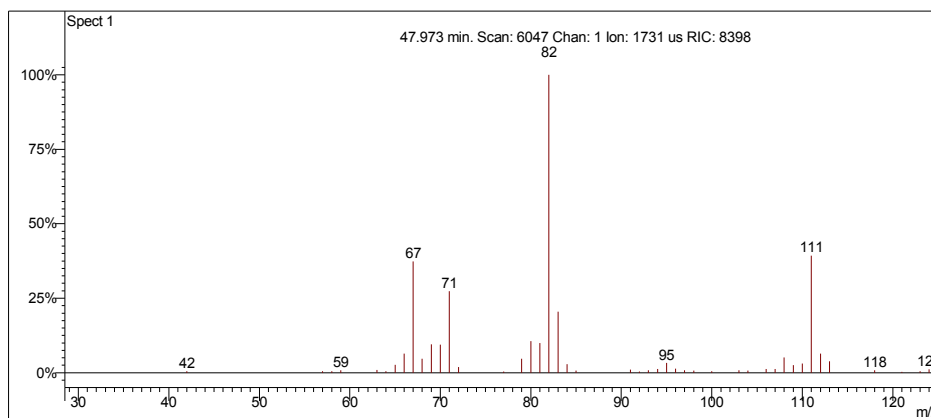
Scan 6251 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 6251, Time: 48.442 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 48.442 min. Scan: 6251 Chan: 1 Ion: 11790 us RIC: 24479 BC
Pair Count: 79 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

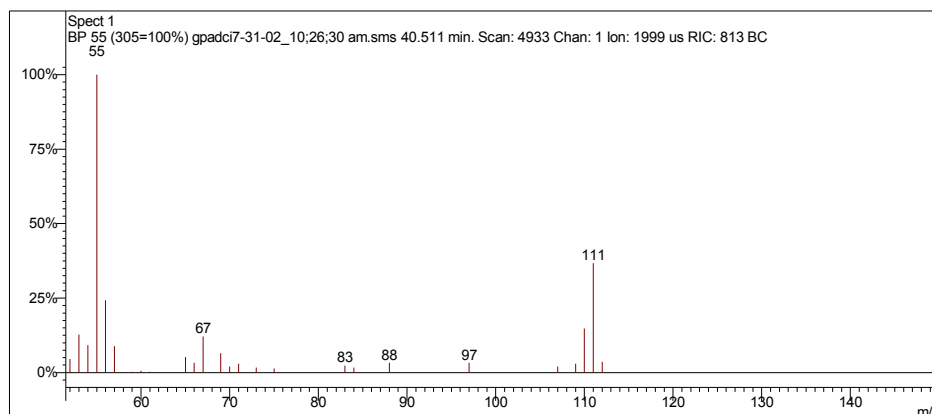
Scan 6047 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 6047, Time: 47.973 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 47.973 min. Scan: 6047 Chan: 1 Ion: 1731 us RIC: 8398
Pair Count: 48 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 4933 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 4933, Time: 40.511 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 40.511 min. Scan: 4933 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 813 BC
Pair Count: 26 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
112	$[M]^{+} = C_8H_{16}^{+}$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
97	$[M - 15]^{+} = C_7H_{13}^{+}$	Perda de metila
83	$[M - 29]^{+} = C_6H_{10}^{+}$	Perda de etila.
67	$C_5H_7^{+}$	Perda de propano com rearranjo de hidrogênio.
55	$C_4H_7^{+}$	Perda de butila.

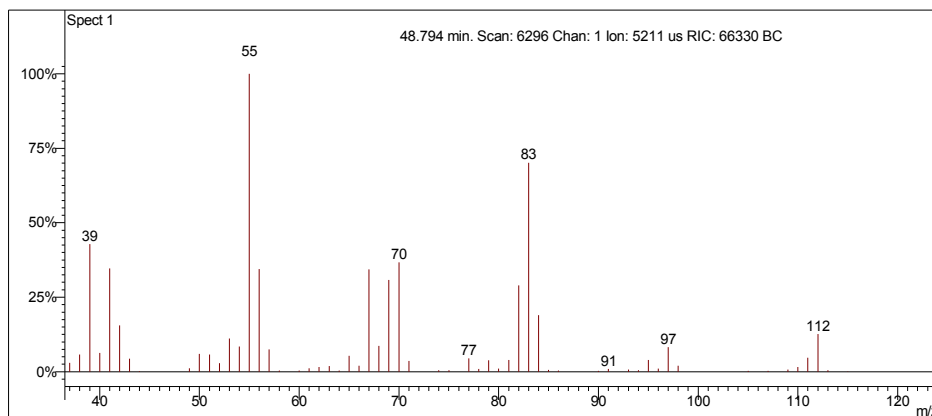
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^{+} = 111$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} = CH_2CN^{+} + \cdot H$ $CH_2CN^{+} + C_8H_{16} = C_8H_{15}^{+} + CH_3CN$		
$[M-1]^{+} = 111$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{+} = CH_2OH^{+} + \cdot H$ $CH_2OH^{+} + C_8H_{16} = C_8H_{15}^{+} + CH_3OH$		

(Z)-1-etil-3-metilciclopentano

Amostra de Gasolina Comum

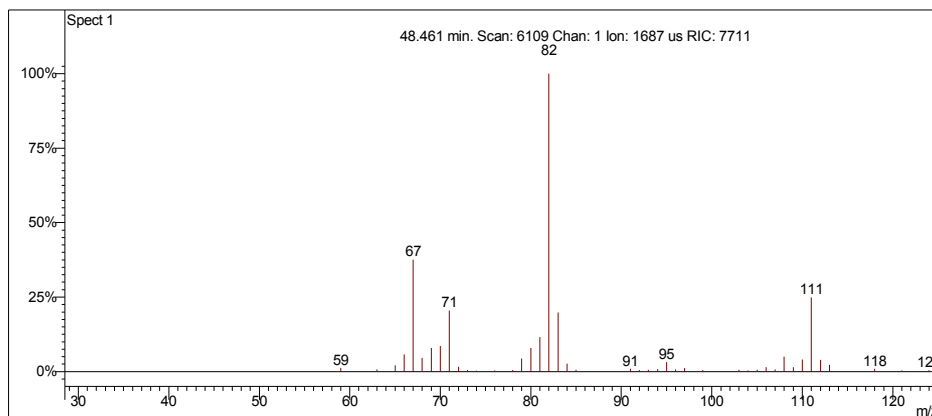
Scan 6296 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 6296, Time: 48.794 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 48.794 min. Scan: 6296 Chan: 1 Ion: 5211 us RIC: 66330 BC
Pair Count: 65 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

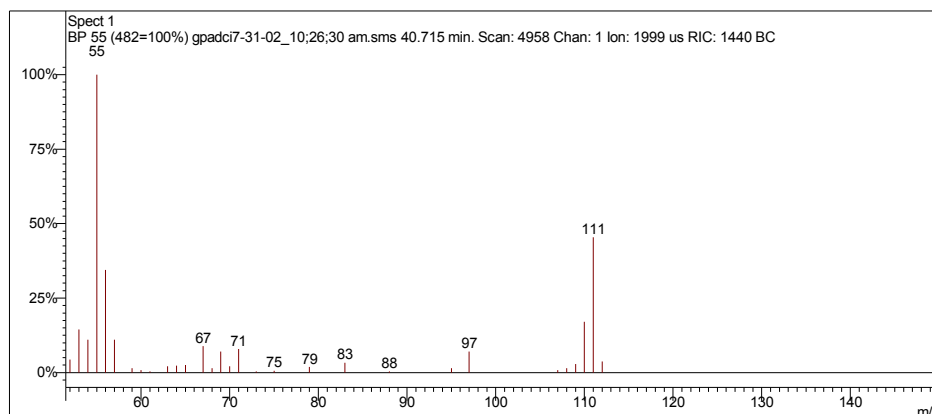
Scan 6109 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 6109, Time: 48.461 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 48.461 min. Scan: 6109 Chan: 1 Ion: 1687 us RIC: 7711
Pair Count: 46 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 4958 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 4958, Time: 40.715 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 40.715 min. Scan: 4958 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1440 BC
Pair Count: 30 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

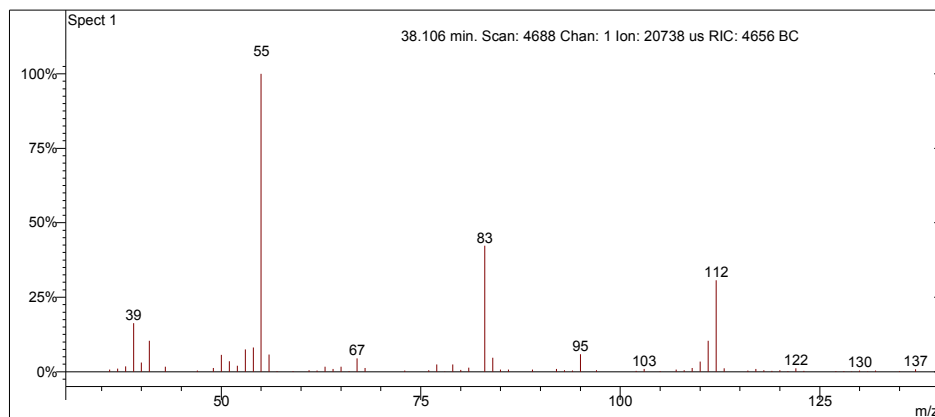
Íon m/z	Fragmento	Observação
112	$[M]^+ = C_8H_{16}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
97	$[M - 15]^+ = C_7H_{13}^+$	Perda de metila
83	$[M - 28]^+ = C_6H_{10}^+$	Perda de eteno.
70	$C_5H_{10}^+$	Fragmentação do anel.
55	$C_4H_7^+$	Perda de butila.

Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^+ = 111$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_8H_{16} = C_8H_{15}^+ + CH_3CN$		
$[M-1]^+ = 111$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{++} = CH_2OH^+ + \cdot H$ $CH_2OH^+ + C_8H_{16} = C_8H_{15}^+ + CH_3OH$		

(E)-1-etil-2-metilciclopentano**Amostra de Gasolina Comum**

Scan 4688 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
 Scan No: 4688, Time: 38.106 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 38.106 min. Scan: 4688 Chan: 1 Ion: 20738 us RIC: 4656 BC
 Pair Count: 109 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Quantidade desprezível.

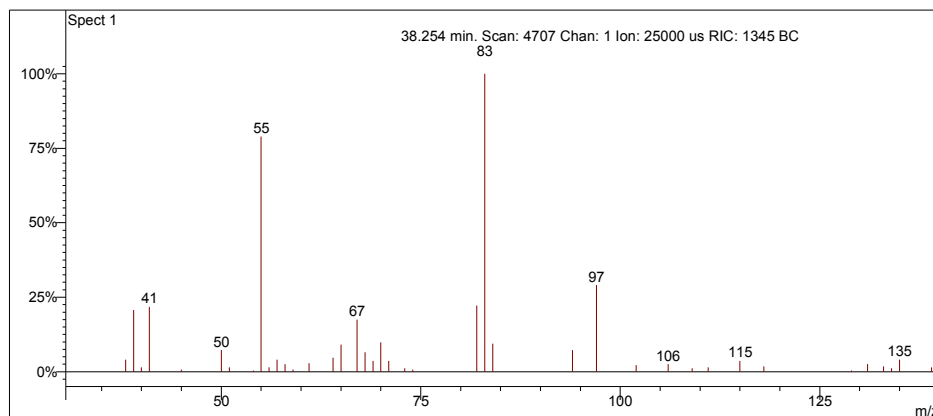
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
112 (ausente)	$[M]^{++} = C_8H_{16}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
83	$[M - 28]^+ = C_6H_{10}^+$	Perda de eteno.
55	$C_4H_7^+$	Perda de butila.

1-etil-1-metilciclopentano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 4707 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
 Scan No: 4707, Time: 38.254 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 38.254 min. Scan: 4707 Chan: 1 Ion: 25000 us RIC: 1345 BC
 Pair Count: 83 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Quantidade desprezível.

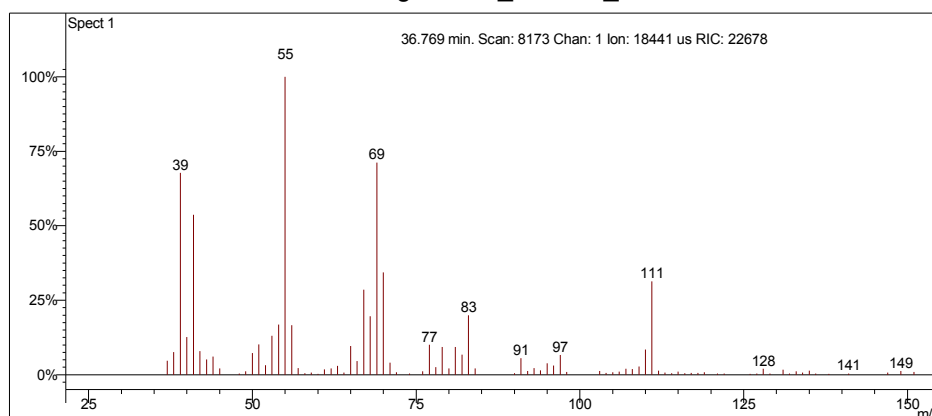
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
112 (ausente)	$[M]^+ = C_8H_{16}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
97	$[M - 15]^+ = C_7H_{13}^+$	Perda de metila.
83	$[M - 28]^+ = C_6H_{10}^+$	Perda de eteno.
55	$C_4H_7^+$	Perda de butila.

Oct-1-eno

Amostra de Gasolina Comum

Scan 8173 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_10;52;54 am.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_10;52;54 am.sms
Scan No: 8173, Time: 36.769 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 36.769 min. Scan: 8173 Chan: 1 Ion: 18441 us RIC: 22678
Pair Count: 111 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Quantidade desprezível.

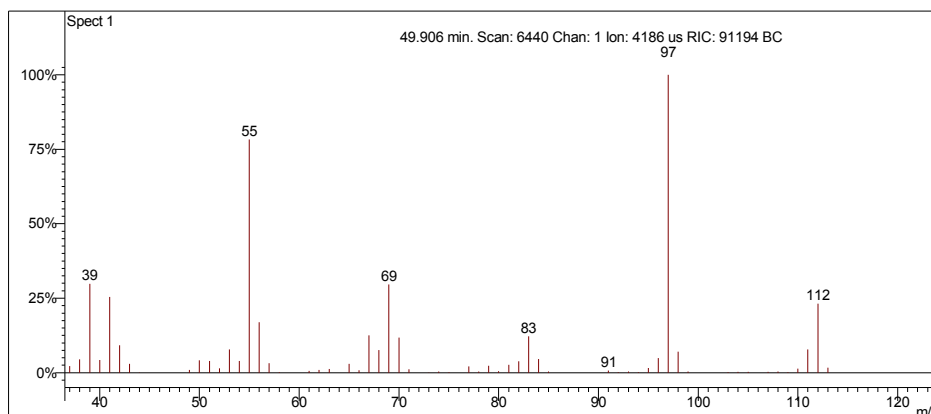
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
112 (ausente)	$[M]^{++} = C_8H_{16}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
97	$[M - 15]^+ = C_7H_{13}^+$	Perda de metila.
83	$[M - 28]^+ = C_6H_{10}^+$	Perda de eteno.
70	$C_5H_{10}^+$	Fragmentação do anel.
55	$C_4H_7^+$	Perda de butila.

(E)-1,2-dimetilcicloexano

Amostra de Gasolina Comum

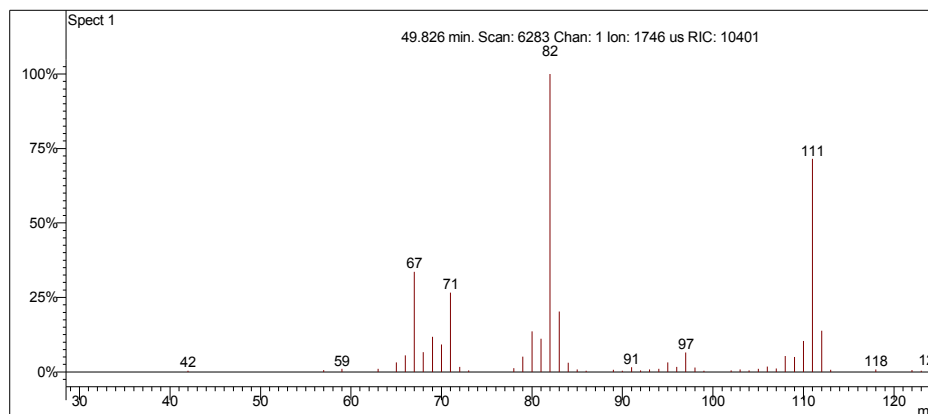
Scan 6440 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 6440, Time: 49.906 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 49.906 min. Scan: 6440 Chan: 1 Ion: 4186 us RIC: 91194 BC
Pair Count: 63 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

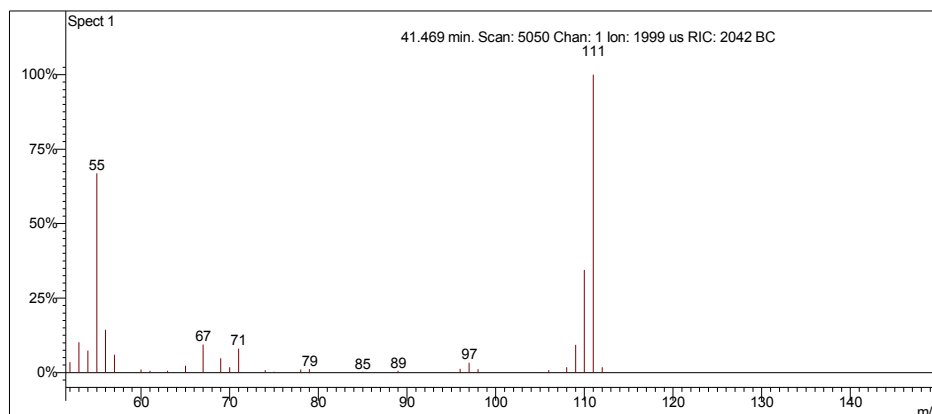
Scan 6283 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 6283, Time: 49.826 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 49.826 min. Scan: 6283 Chan: 1 Ion: 1746 us RIC: 10401
Pair Count: 53 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 5050 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 5050, Time: 41.469 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 41.469 min. Scan: 5050 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 2042 BC
Pair Count: 30 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
112	$[M]^+ = C_8H_{16}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
97	$[M - 15]^+ = C_7H_{13}^+$	Perda de metila.
83	$[M - 28]^+ = C_6H_{10}^+$	Perda de eteno.
69	$C_5H_9^+$	Perda de propila.
55	$C_4H_7^+$	Perda de butila.

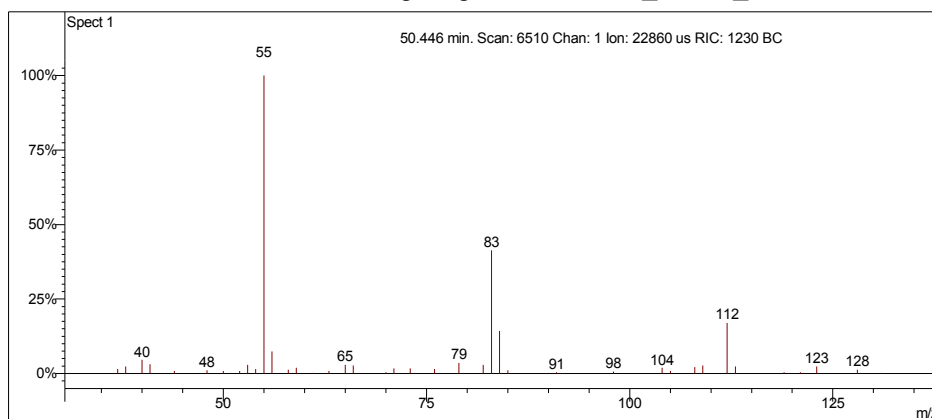
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^+ = 111$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_8H_{16} = C_8H_{15}^+ + CH_3CN$		
$[M-1]^+ = 111$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{++} = CH_2OH^+ + \cdot H$ $CH_2OH^+ + C_8H_{16} = C_8H_{15}^+ + CH_3OH$		

Desconhecido 18

Amostra de Gasolina Comum

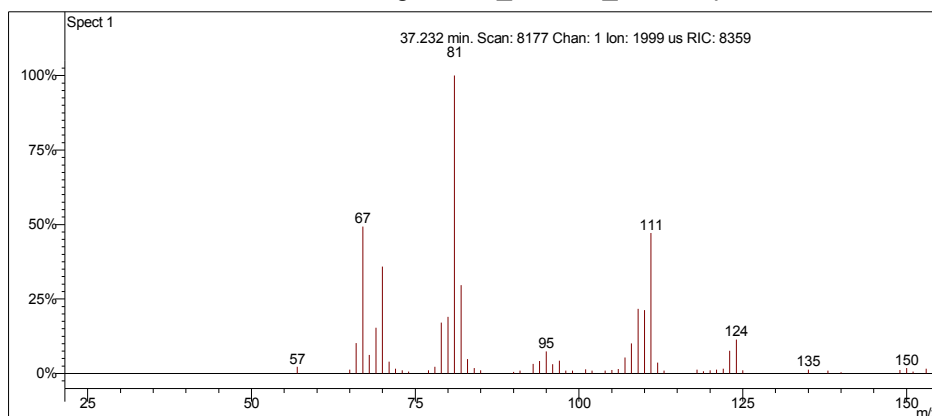
Scan 6510 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 6510, Time: 50.446 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 50.446 min. Scan: 6510 Chan: 1 Ion: 22860 us RIC: 1230 BC
Pair Count: 54 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 8177 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms
Scan No: 8177, Time: 37.232 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 37.232 min. Scan: 8177 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 8359
Pair Count: 74 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Interpretação do Fragmentograma

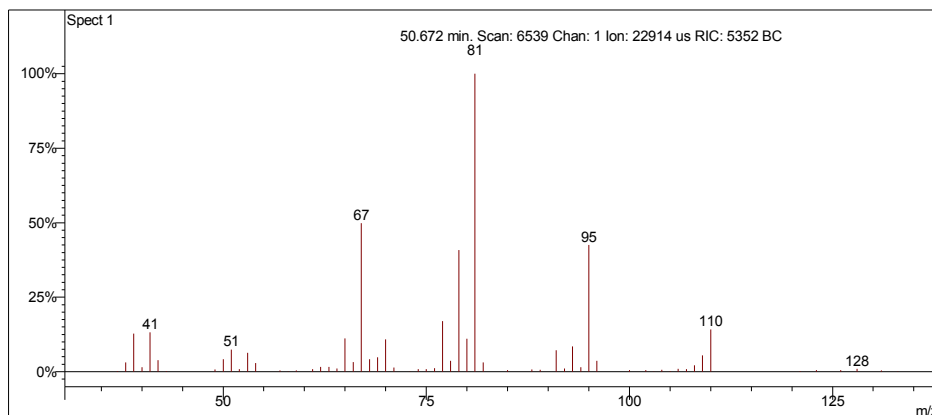
Íon m/z	Fragmento	Observação
112	$[M]^+ = C_8H_{16}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
83	$[M - 28]^+ = C_6H_{10}^+$	Perda de eteno.
55	$C_4H_7^+$	Perda de butila.
Conclusão: a substância é um naftênico ramificado com 8 carbonos.		

Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^+ = 111$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_8H_{16} = C_8H_{15}^+ + CH_3CN$		
Sem sinal		Metanol
Quantidade desprezível.		

Desconhecido 19

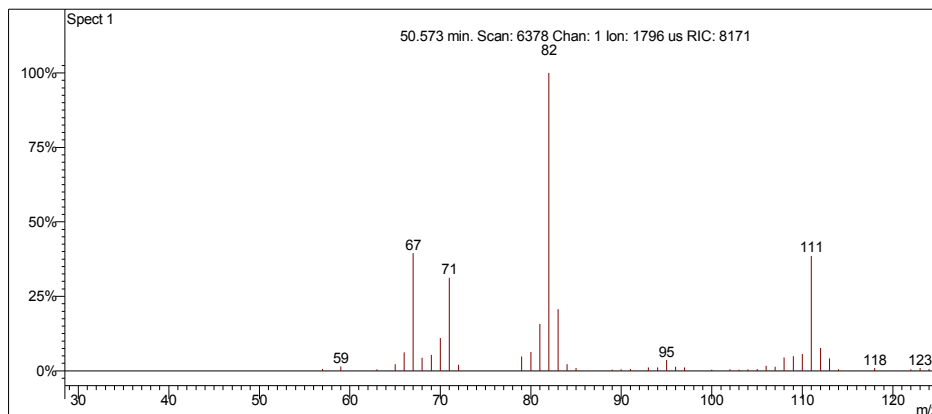
Scan 6539 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 6539, Time: 50.672 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 50.672 min. Scan: 6539 Chan: 1 Ion: 22914 us RIC: 5352 BC
Pair Count: 83 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

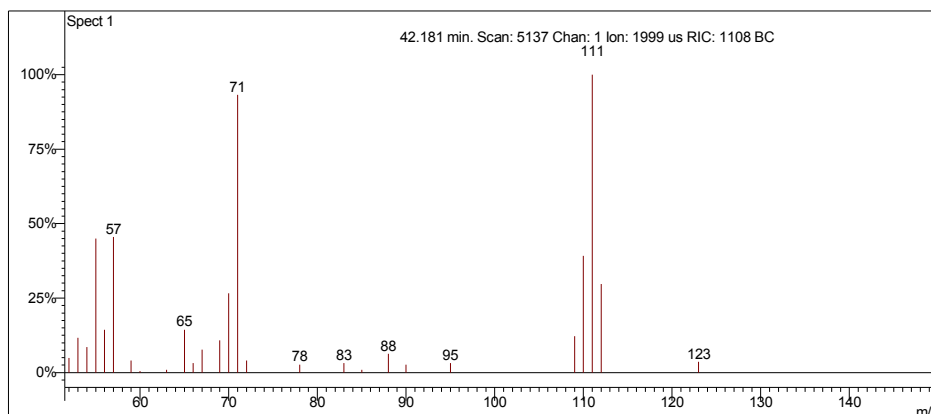
Scan 6378 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 6378, Time: 50.573 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 50.573 min. Scan: 6378 Chan: 1 Ion: 1796 us RIC: 8171
Pair Count: 49 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 5137 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 5137, Time: 42.181 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 42.181 min. Scan: 5137 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1108 BC
 Pair Count: 27 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
110	$[M]^+ = C_8H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância, confirmado por ionização química.
95	$[M - 15]^+ = C_7H_{11}^+$	Perda de metila.
81	$[M - 29]^+ = C_7H_{11}^+$	Perda de etila. Pico base.
67	$[M - 43]^+ = C_3H_7^+$	Fragmentação do anel. Perda de propila.
Conclusão: a substância é um olefínico cíclico com 8 carbonos.		

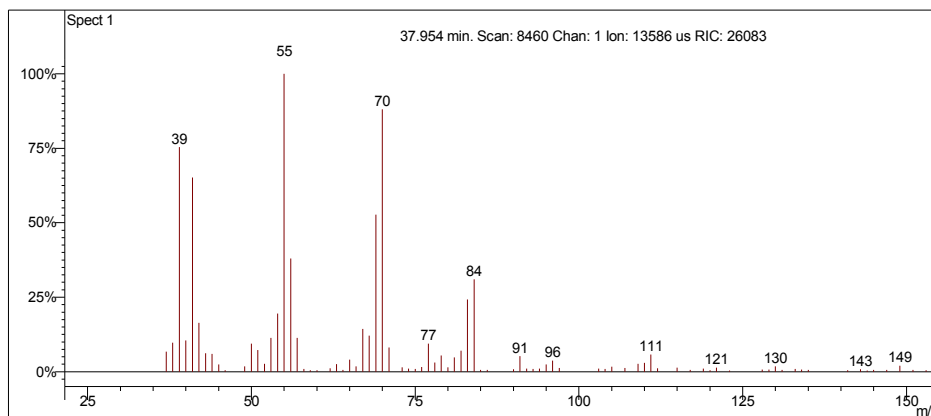
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 111$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_8H_{14} = C_8H_{15}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 111$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_8H_{14} = C_8H_{15}^+ + CH_3OH$		

(1Z,2Z,3Z)-1,2,3-trimetilciclopentano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 8460 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_10;52;54 am.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_10;52;54 am.sms
Scan No: 8460, Time: 37.954 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 37.954 min. Scan: 8460 Chan: 1 Ion: 13586 us RIC: 26083
Pair Count: 93 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Quantidade desprezível. Ionização química instável.

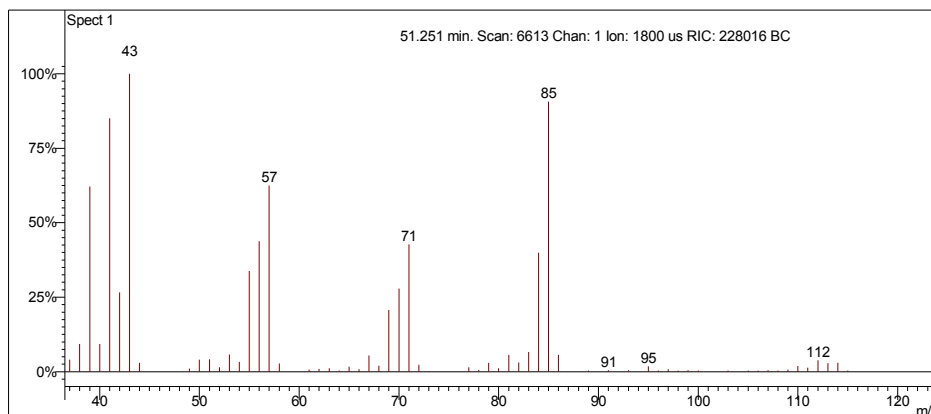
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
112 (ausente)	$[M]^+ = C_8H_{16}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
97	$[M - 15]^+ = C_7H_{13}^+$	Perda de metila.
83	$[M - 28]^+ = C_6H_{10}^+$	Perda de eteno.
70	$C_5H_{10}^+$	Fragmentação do anel.
55	$C_4H_7^+$	Perda de butila.

Octano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 6613 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 6613, Time: 51.251 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 51.251 min. Scan: 6613 Chan: 1 Ion: 1800 us RIC: 228016 BC
Pair Count: 65 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

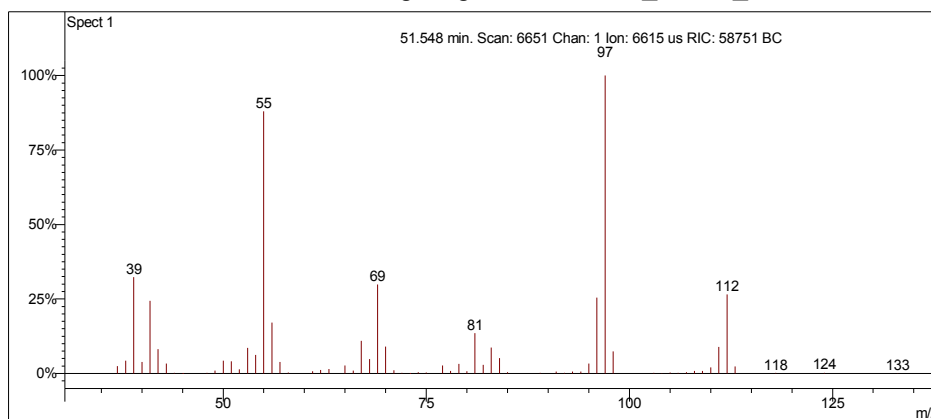
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
114 (ausente)	$[M]^{++} = C_8H_{18}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear.
85	$[M - 29]^+ = C_6H_{13}^+$	Perda de etila.
71	$C_5H_{11}^+$	Perda de propila.
57	$C_4H_9^+$	Perda de butila.

Desconhecido 20

Amostra de Gasolina Comum

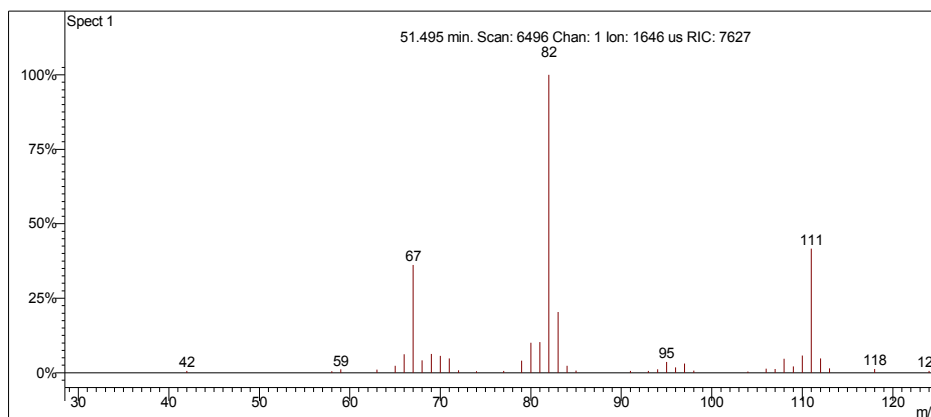
Scan 6651 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 6651, Time: 51.548 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 51.548 min. Scan: 6651 Chan: 1 Ion: 6615 us RIC: 58751 BC
Pair Count: 73 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

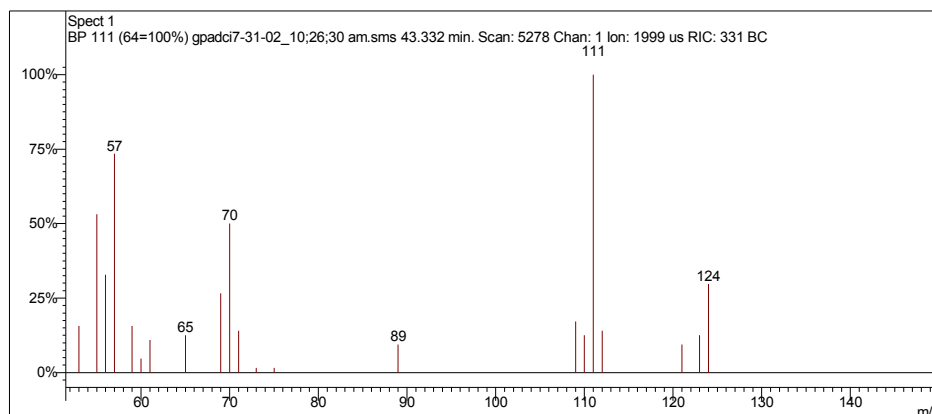
Scan 6496 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 6496, Time: 51.495 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 51.495 min. Scan: 6496 Chan: 1 Ion: 1646 us RIC: 7627
Pair Count: 41 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 5278 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 5278, Time: 43.332 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 43.332 min. Scan: 5278 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 331 BC
Pair Count: 21 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
112	$[M]^{+} = C_8H_{16}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula cíclica.
97	$[M - 15]^{+} = C_7H_{13}^{+}$	Perda de metila.
69	$C_5H_9^{+}$	Perda de propila.
55	$C_4H_7^{+}$	Perda de butila.
Conclusão: a substância é um naftênico ramificado com 8 carbonos.		

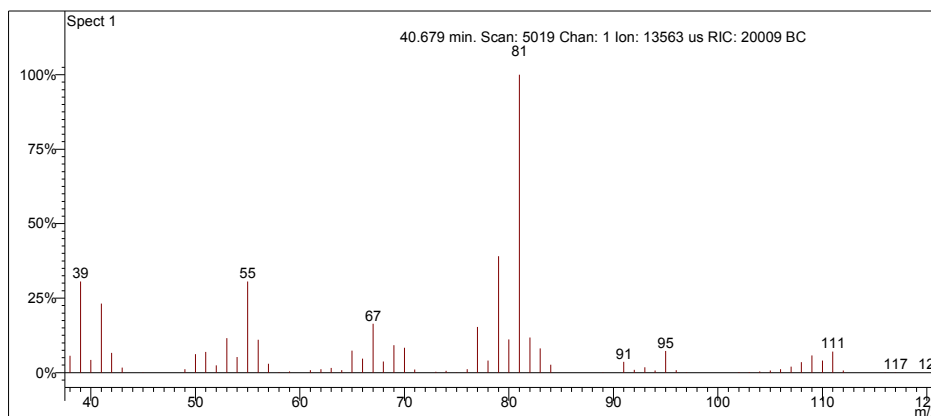
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^{+} = 111$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} = CH_2CN^{+} + \cdot H$ $CH_2CN^{+} + C_8H_{16} = C_8H_{15}^{+} + CH_3CN$		
$[M-1]^{+} = 111$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{+} = CH_2OH^{+} + \cdot H$ $CH_2OH^{+} + C_8H_{16} = C_8H_{15}^{+} + CH_3OH$		

Desconhecido 21

Amostra de Gasolina Comum

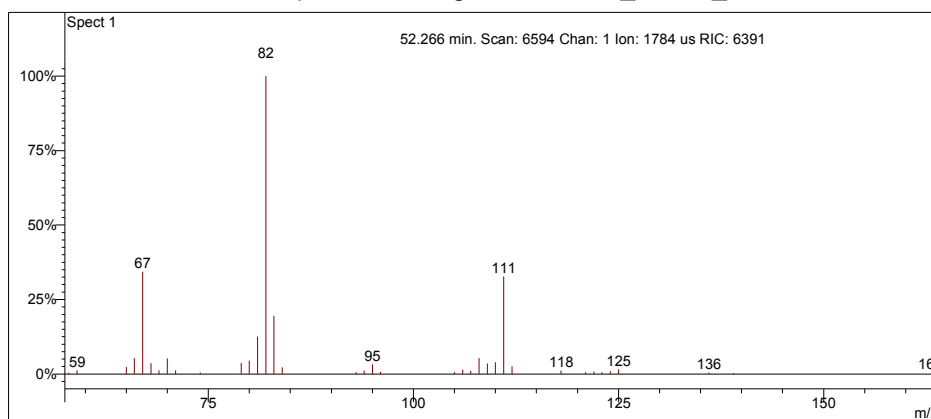
Scan 5019 from d:\gasolina\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from d:\gasolina\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 5019, Time: 40.679 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 40.679 min. Scan: 5019 Chan: 1 Ion: 13563 us RIC: 20009 BC
Pair Count: 106 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

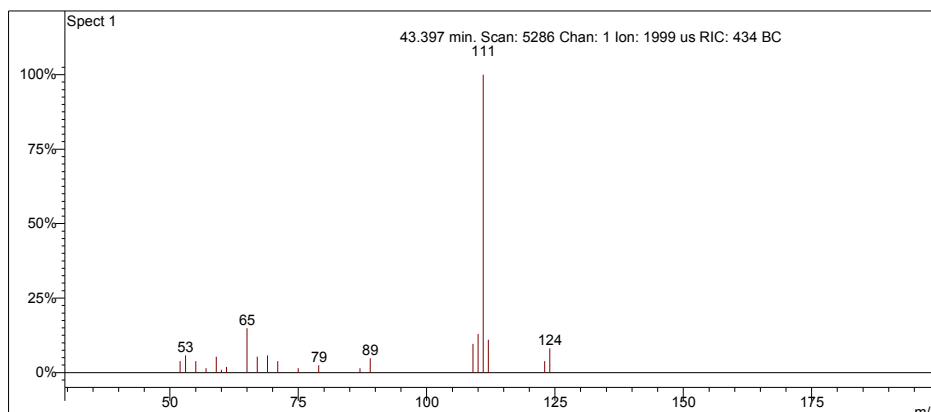
Scan 6594 from c:\... \spectrometria\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 6594, Time: 52.266 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 52.266 min. Scan: 6594 Chan: 1 Ion: 1784 us RIC: 6391
Pair Count: 37 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 5286 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10_26_30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10_26_30 am.sms

Scan No: 5286, Time: 43.397 minutes

No averaging. Background corrected.

Comment: 43.397 min. Scan: 5286 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 434 BC

Pair Count: 21 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
110	$[M]^{++} = C_8H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância, confirmado por ionização química.
95	$[M - 15]^+ = C_7H_{11}^+$	Perda de metila. Pico base.
81	$[M - 29]^+ = C_7H_{11}^+$	Perda de etila. Pico base.
67	$[M - 43]^+ = C_3H_7^+$	Fragmentação do anel. Perda de propila.
55	$C_4H_7^+$	Fragmentação do anel.

Conclusão: a substância é um olefínico cíclico com 8 carbonos.

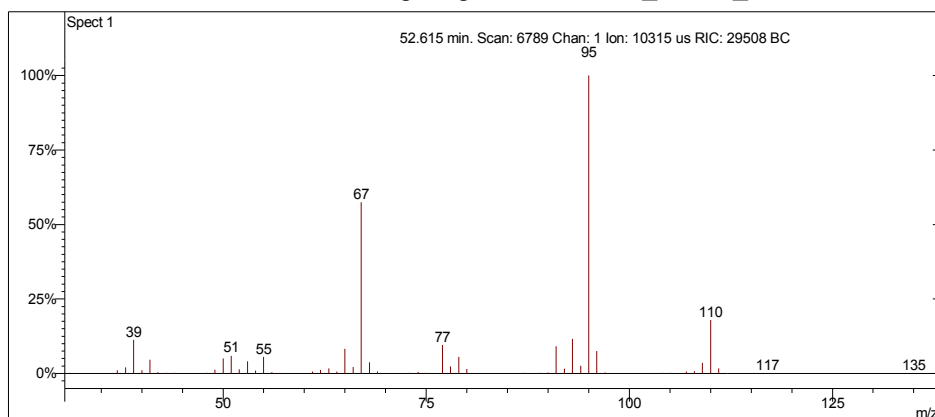
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 111$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_8H_{14} = C_8H_{15}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 111$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_8H_{14} = C_8H_{15}^+ + CH_3OH$		

Desconhecido 22

Amostra de Gasolina Comum

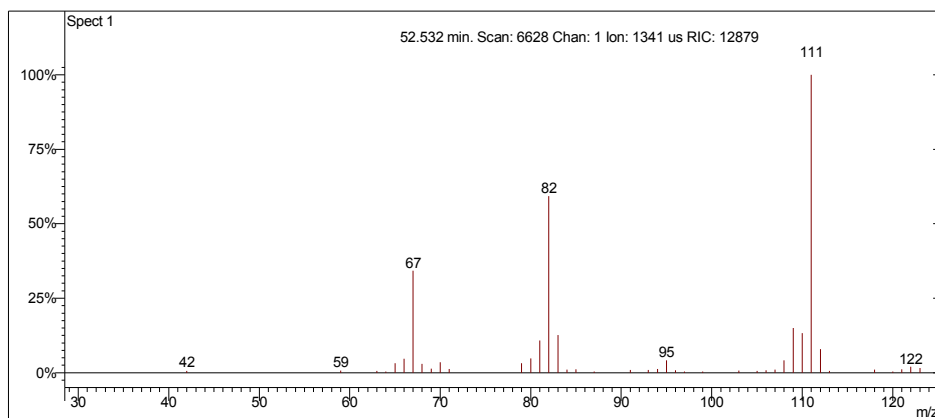
Scan 6789 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 6789, Time: 52.615 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 52.615 min. Scan: 6789 Chan: 1 Ion: 10315 us RIC: 29508 BC
Pair Count: 62 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

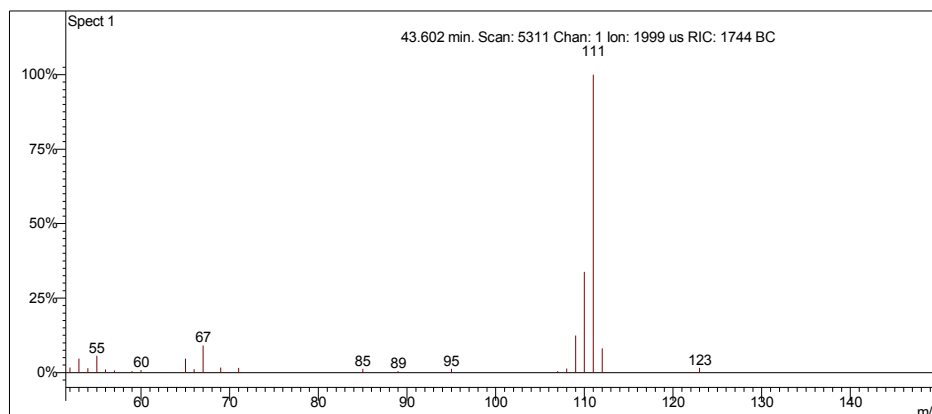
Scan 6628 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 6628, Time: 52.532 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 52.532 min. Scan: 6628 Chan: 1 Ion: 1341 us RIC: 12879
Pair Count: 43 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 5311 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 5311, Time: 43.602 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 43.602 min. Scan: 5311 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1744 BC
 Pair Count: 25 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
110	$[M]^+ = C_8H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância, confirmado por ionização química.
95	$[M - 15]^+ = C_7H_{11}^+$	Perda de metila. Pico base.
67	$[M - 43]^+ = C_3H_7^+$	Fragmentação do anel. Perda de propila.
Conclusão: a substância é um olefínico cíclico com 8 carbonos.		

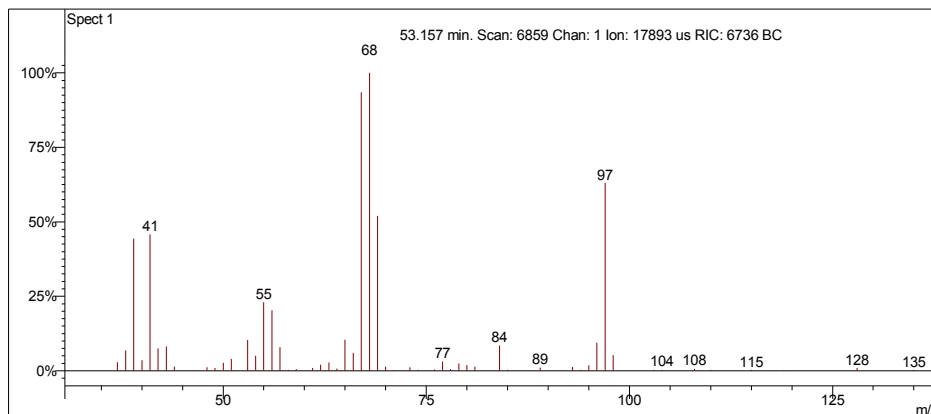
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 111$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_8H_{14} = C_8H_{15}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 111$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_8H_{14} = C_8H_{15}^+ + CH_3OH$		

Isopropilciclopentano

Amostra de Gasolina Comum

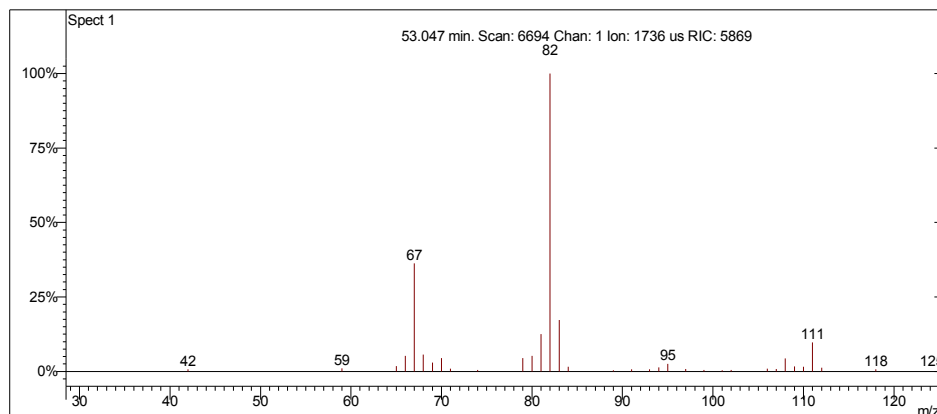
Scan 6859 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 6859, Time: 53.157 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 53.157 min. Scan: 6859 Chan: 1 Ion: 17893 us RIC: 6736 BC
Pair Count: 73 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

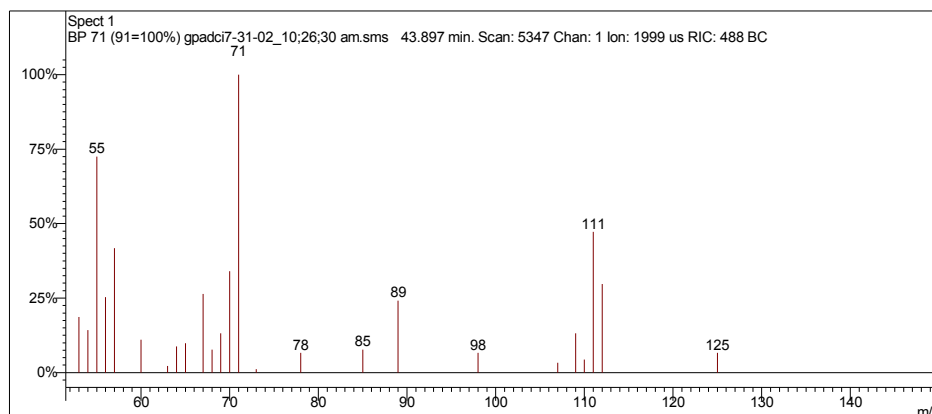
Scan 6694 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 6694, Time: 53.047 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 53.047 min. Scan: 6694 Chan: 1 Ion: 1736 us RIC: 5869
Pair Count: 35 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 5347 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 5347, Time: 43.897 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 43.897 min. Scan: 5347 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 488 BC
Pair Count: 25 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

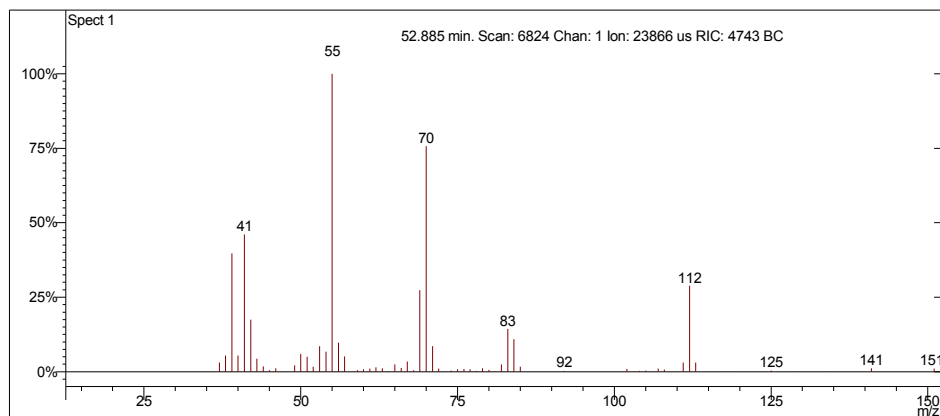
Íon m/z	Fragmento	Observação
112	$[M]^+ = C_8H_{16}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
97	$[M - 15]^+ = C_7H_{13}^+$	Perda de metila.
84	$[M - 28]^+ = C_6H_{10}^+$	Perda de eteno.
69	$C_5H_9^+$	Perda de propila.
55	$C_4H_7^+$	Perda de butila.

Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^+ = 111$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_8H_{16} = C_8H_{15}^+ + CH_3CN$		
$[M-1]^+ = 111$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{++} = CH_2OH^+ + \cdot H$ $CH_2OH^+ + C_8H_{16} = C_8H_{15}^+ + CH_3OH$		

(Z)-Oct-2-eno**Amostra de Gasolina Comum**

Scan 6824 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
 Scan No: 6824, Time: 52.885 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 52.885 min. Scan: 6824 Chan: 1 Ion: 23866 us RIC: 4743 BC
 Pair Count: 81 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Quantidade desprezível.

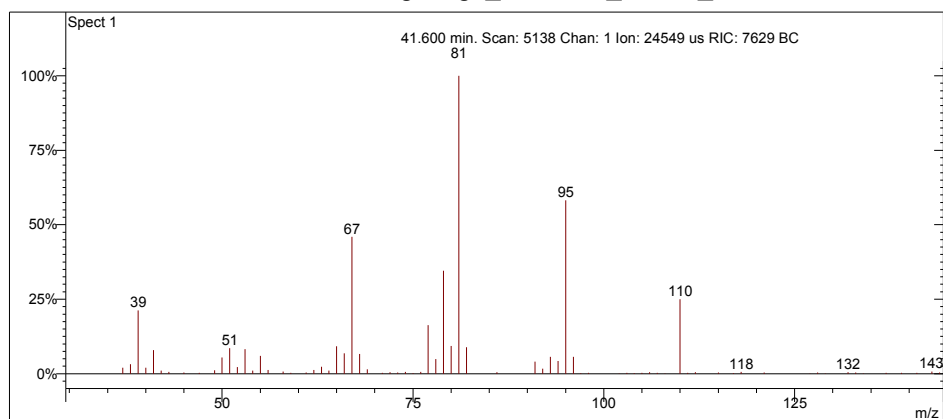
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
112	$[M]^+ = C_8H_{16}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula cíclica.
83	$[M - 29]^+ = C_6H_{10}^+$	Perda de etila.
70	$C_5H_{10}^+$	Fragmentação simples.
55	$C_4H_7^+$	Perda de butila.

Desconhecido 23

Amostra de Gasolina Comum

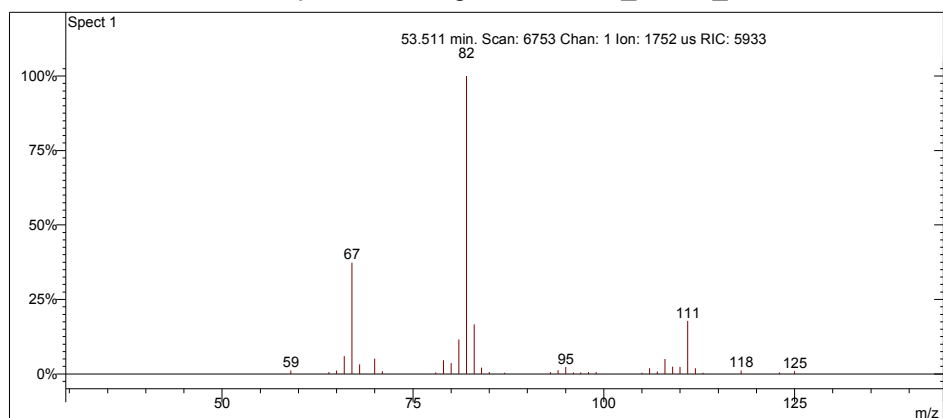
Scan 5138 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 5138, Time: 41.600 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 41.600 min. Scan: 5138 Chan: 1 Ion: 24549 us RIC: 7629 BC
Pair Count: 103 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

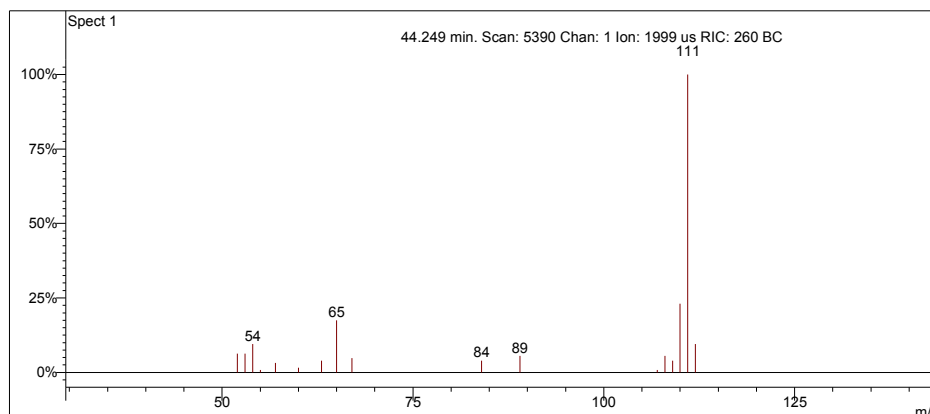
Scan 6753 from c:\... \espectrometria\gasolinaciact_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \gasolinaciact_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 6753, Time: 53.511 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 53.511 min. Scan: 6753 Chan: 1 Ion: 1752 us RIC: 5933
Pair Count: 37 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 5390 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10_26_30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10_26_30 am.sms
Scan No: 5390, Time: 44.249 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 44.249 min. Scan: 5390 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 260 BC
Pair Count: 17 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
110	$[M]^{++} = C_8H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância, confirmado por ionização química.
95	$[M - 15]^+ = C_7H_{11}^+$	Perda de metila. Pico base.
81	$[M - 29]^+ = C_7H_{11}^+$	Perda de etila. Pico base.
67	$[M - 43]^+ = C_3H_7^+$	Fragmentação do anel. Perda de propila.
55	$C_4H_7^+$	Fragmentação do anel.

Conclusão: a substância é um olefínico cíclico com 8 carbonos.

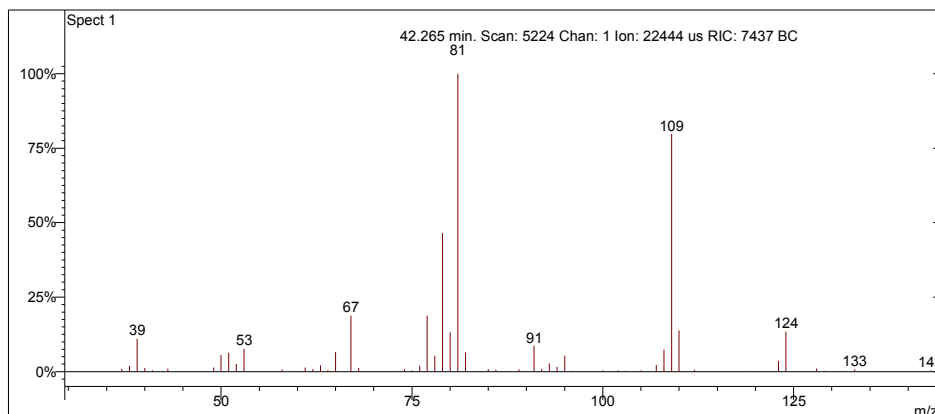
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 111$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_8H_{14} = C_8H_{15}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 111$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_8H_{14} = C_8H_{15}^+ + CH_3OH$		

Desconhecido 24

Amostra de Gasolina Comum

Scan 5224 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms

Scan No: 5224, Time: 42.265 minutes

No averaging. Background corrected.

Comment: 42.265 min. Scan: 5224 Chan: 1 Ion: 22444 us RIC: 7437 BC

Pair Count: 90 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

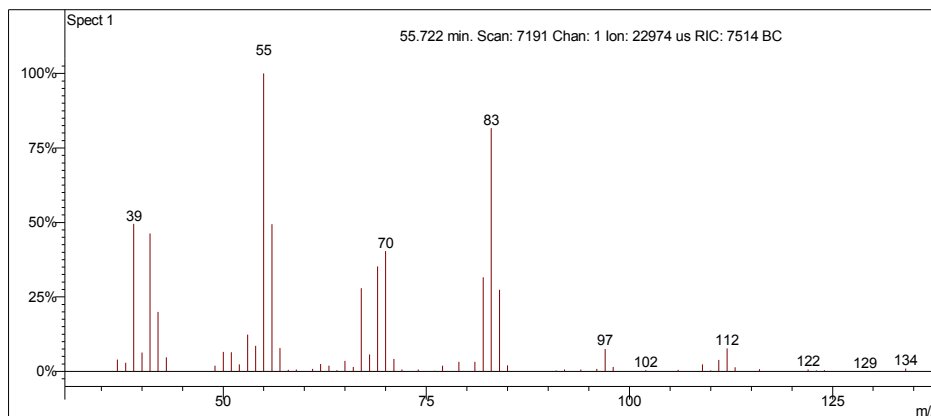
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
124	$[M]^+ = C_9H_{16}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula cíclica ou com ressonância.
109	$[M - 15]^+ = C_8H_{13}^+$	Perda de metila.
81	$C_6H_9^+$	Fragmentação do anel com rearranjos de hidrogênio.
67	$C_5H_7^+$	Fragmentação do anel com rearranjos de hidrogênio.
Conclusão: a substância é um olefínico com 9 carbonos.		

(Z)-1-etil-2-metilciclopentano

Amostra de Gasolina Comum

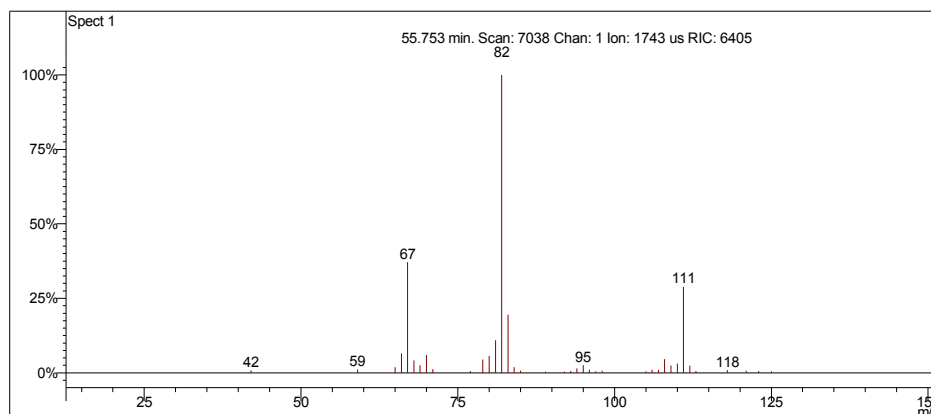
Scan 7191 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 7191, Time: 55.722 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 55.722 min. Scan: 7191 Chan: 1 Ion: 22974 us RIC: 7514 BC
Pair Count: 75 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

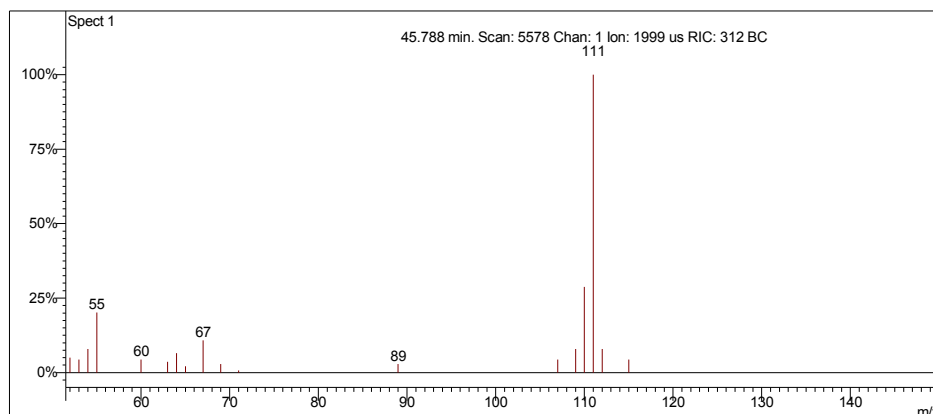
Scan 7038 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 7038, Time: 55.753 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 55.753 min. Scan: 7038 Chan: 1 Ion: 1743 us RIC: 6405
Pair Count: 38 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 5578 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 5578, Time: 45.788 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 45.788 min. Scan: 5578 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 312 BC
Pair Count: 18 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
112	$[M]^{+} = C_8H_{16}^{+}$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
97	$[M - 15]^{+} = C_7H_{13}^{+}$	Perda de metila.
83	$[M - 29]^{+} = C_6H_{10}^{+}$	Perda de etila.
70	$C_5H_{10}^{+}$	Fragmentação do anel.
55	$C_4H_7^{+}$	Perda de butila.

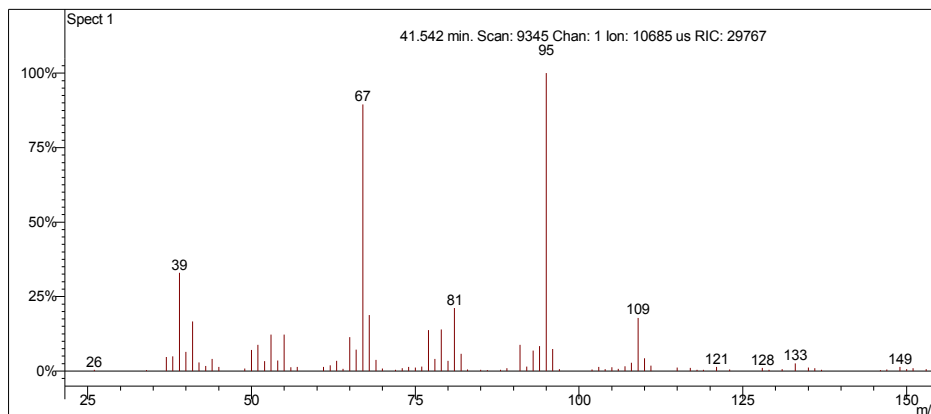
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^{+} = 111$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} = CH_2CN^{+} + \cdot H$ $CH_2CN^{+} + C_8H_{16} = C_8H_{15}^{+} + CH_3CN$		
$[M-1]^{+} = 111$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{++} = CH_2OH^{+} + \cdot H$ $CH_2OH^{+} + C_8H_{16} = C_8H_{15}^{+} + CH_3OH$		

Desconhecido 25

Amostra de Gasolina Comum

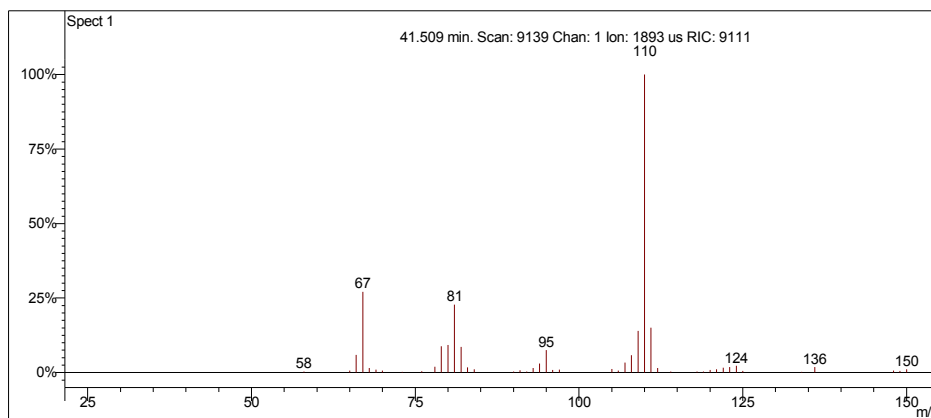
Scan 9345 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_10;52;54 am.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_10;52;54 am.sms
Scan No: 9345, Time: 41.542 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 41.542 min. Scan: 9345 Chan: 1 Ion: 10685 us RIC: 29767
Pair Count: 109 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 9139 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms
Scan No: 9139, Time: 41.509 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 41.509 min. Scan: 9139 Chan: 1 Ion: 1893 us RIC: 9111
Pair Count: 56 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
110	$[M]^{++} = C_8H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância, confirmado por ionização química.
95	$[M - 15]^+ = C_7H_{11}^+$	Perda de metila. Pico base.
67	$[M - 43]^+ = C_3H_7^+$	Fragmentação do anel. Perda de propila.
Conclusão: a substância é um olefínico cíclico com 8 carbonos.		

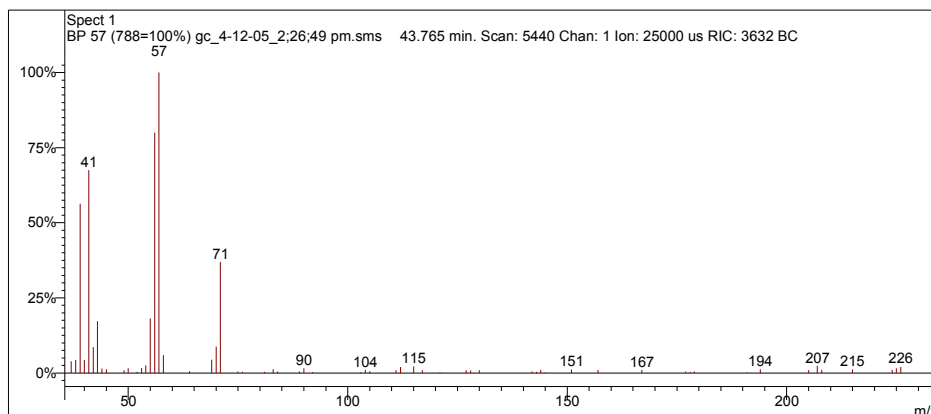
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M]^{++} = 110$	Transferência de carga.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + C_8H_{14} = C_8H_{14}^{++} + CH_3CN$		
Sem sinal		Metanol
Quantidade desprezível.		

2,2-dimetileptano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 5440 from c:\... \doutorado\amostras\cgms\gc_4-12-05_2;26;49 pm.sms



Spectrum from c:\... \amostras\cgms\gc_4-12-05_2;26;49 pm.sms
Scan No: 5440, Time: 43.765 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 43.765 min. Scan: 5440 Chan: 1 Ion: 25000 us RIC: 3632 BC
Pair Count: 61 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Quantidade desprezível.

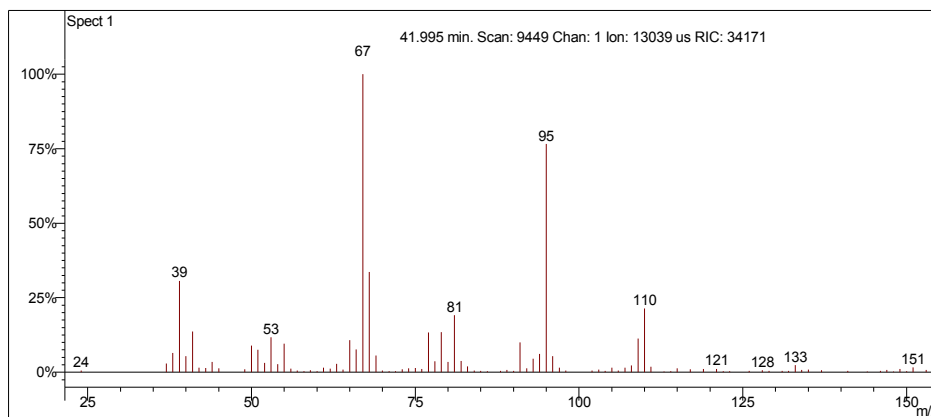
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
128 (ausente)	$[M]^+ = C_9H_{20}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
71	$C_5H_7^+$	Perda de butano com rearranjo de hidrogênio.
57	$C_4H_9^+$	Perda de pentila.
43	$C_3H_7^+$	Fragmentação alílica.

Desconhecido 26

Amostra de Gasolina Comum

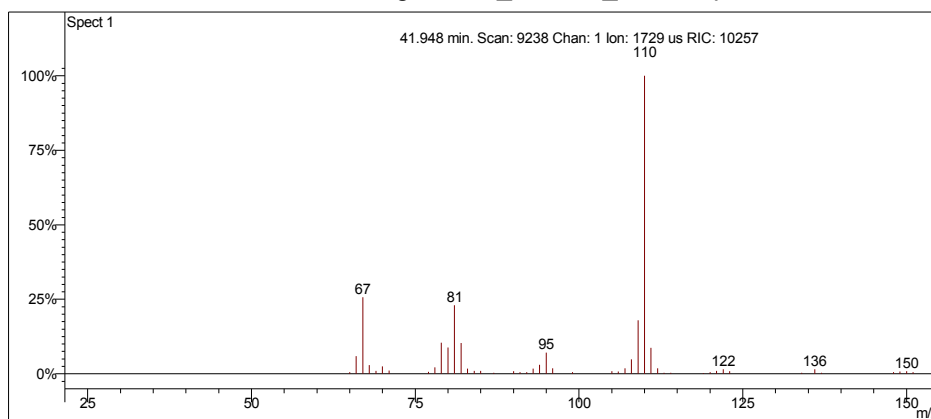
Scan 9449 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_10;52;54 am.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_10;52;54 am.sms
Scan No: 9449, Time: 41.995 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 41.995 min. Scan: 9449 Chan: 1 Ion: 13039 us RIC: 34171
Pair Count: 129 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 9238 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_2;38;30 pm.sms
Scan No: 9238, Time: 41.948 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 41.948 min. Scan: 9238 Chan: 1 Ion: 1729 us RIC: 10257
Pair Count: 57 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
110	$[M]^{+} = C_8H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância, confirmado por ionização química.
95	$[M - 15]^{+} = C_7H_{11}^{+}$	Perda de metila. Pico base.
67	$[M - 43]^{+} = C_3H_7^{+}$	Fragmentação do anel. Perda de propila.
Conclusão: a substância é um olefínico cíclico com 8 carbonos.		

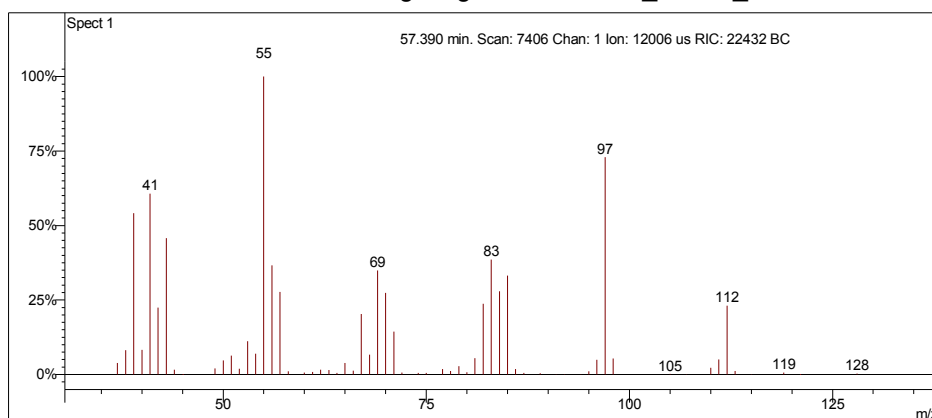
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M]^{+} = 110$	Transferência de carga.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} + C_8H_{14} = C_8H_{14}^{+} + CH_3CN$		
Sem sinal		Metanol
Quantidade desprezível.		

(Z)-1,2-dimetilcicloexano

Amostra de Gasolina Comum

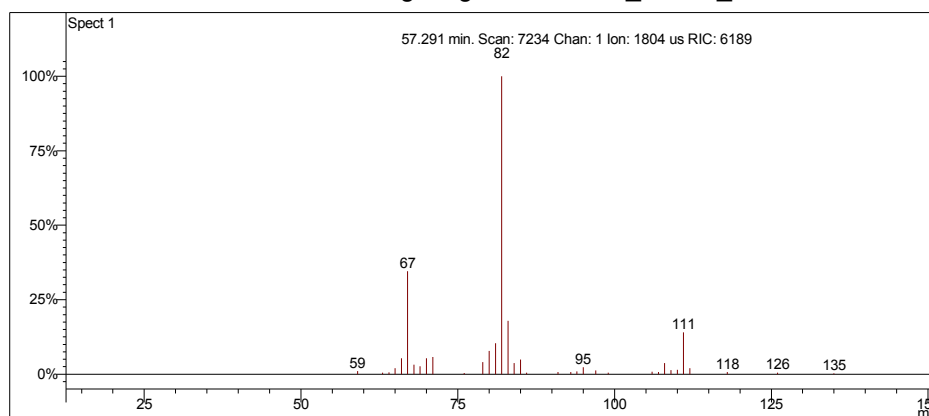
Scan 7406 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 7406, Time: 57.390 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 57.390 min. Scan: 7406 Chan: 1 Ion: 12006 us RIC: 22432 BC
Pair Count: 71 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

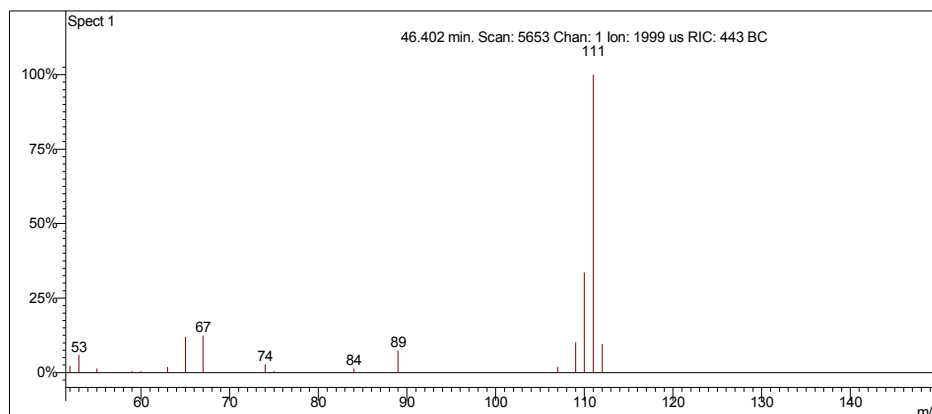
Scan 7234 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 7234, Time: 57.291 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 57.291 min. Scan: 7234 Chan: 1 Ion: 1804 us RIC: 6189
Pair Count: 35 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 5653 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 5653, Time: 46.402 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 46.402 min. Scan: 5653 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 443 BC
Pair Count: 17 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
112	$[M]^{++} = C_8H_{16}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula cíclica.
97	$[M - 15]^+ = C_7H_{13}^+$	Perda de metila.
83	$[M - 29]^+ = C_6H_{10}^+$	Perda de etila.
70	$C_5H_{10}^+$	Fragmentação do anel.
55	$C_4H_7^+$	Perda de butila.

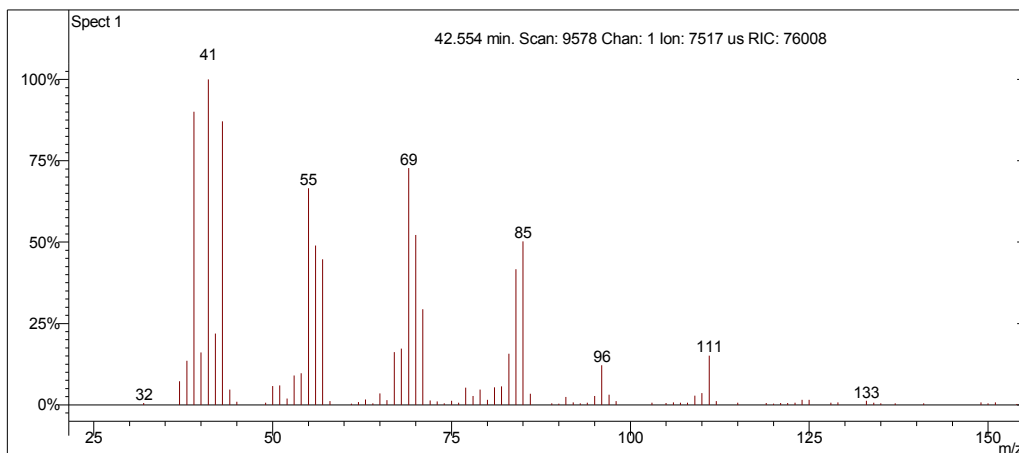
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^+ = 111$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_8H_{16} = C_8H_{15}^+ + CH_3CN$		
$[M-1]^+ = 111$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{++} = CH_2OH^+ + \cdot H$ $CH_2OH^+ + C_8H_{16} = C_8H_{15}^+ + CH_3OH$		

2,4-dimetileptano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 9578 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_10;52;54 am.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_10;52;54 am.sms
Scan No: 9578, Time: 42.554 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 42.554 min. Scan: 9578 Chan: 1 Ion: 7517 us RIC: 76008
Pair Count: 106 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

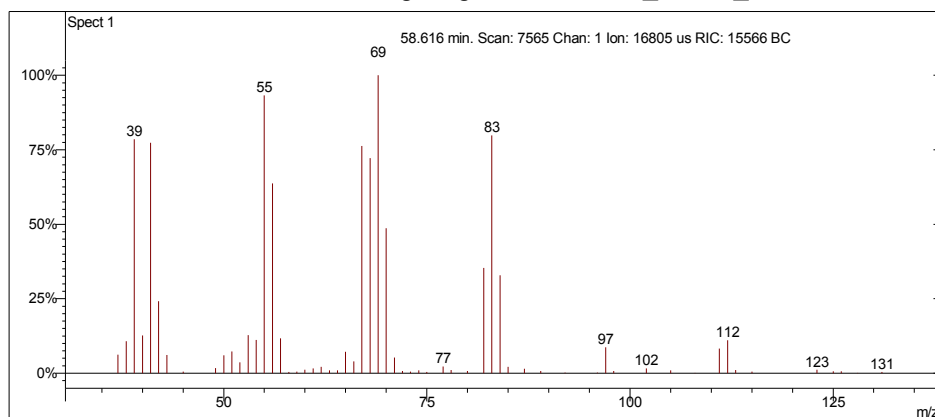
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
128 (ausente)	$[M]^+ = C_9H_{20}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
111	$[M - 15]^+ = C_8H_{15}^+$	Perda de metila com rearranjos de hidrogênio.
85	$C_6H_{13}^+$	Perda de isobutila ou butila.
69	$C_5H_9^+$	Perda de butano com rearranjo de hidrogênio.
55	$C_4H_7^+$	Fragmentação alílica.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação alílica.

Propilciclopentano

Amostra de Gasolina Comum

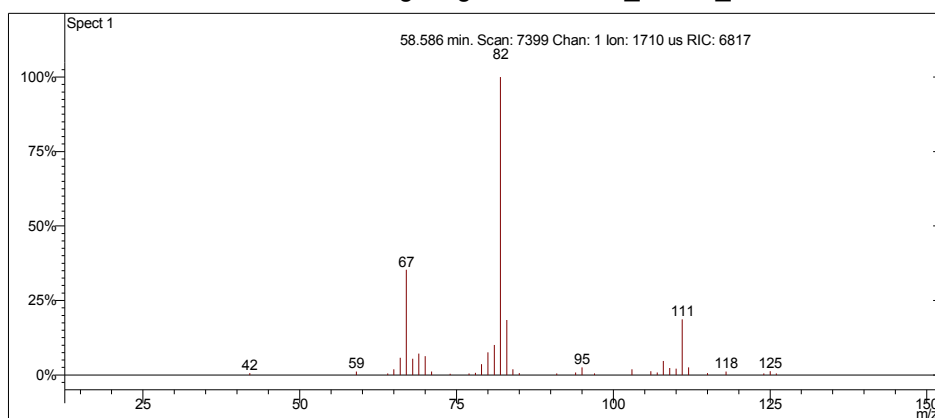
Scan 7565 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 7565, Time: 58.616 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 58.616 min. Scan: 7565 Chan: 1 Ion: 16805 us RIC: 15566 BC
Pair Count: 72 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

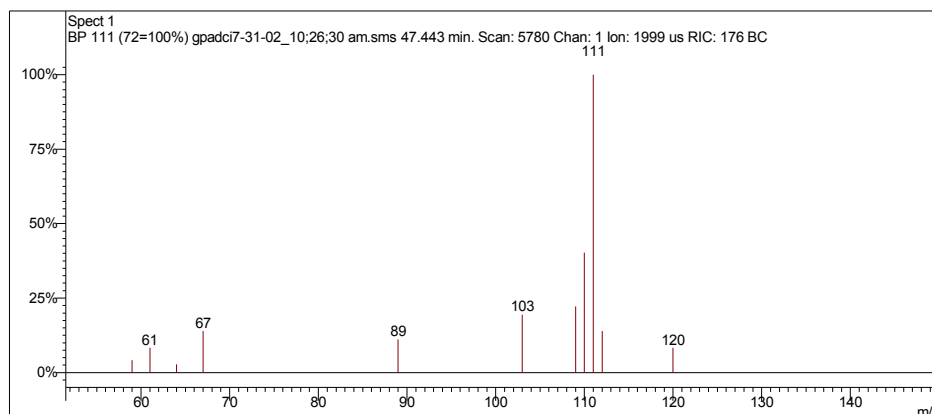
Scan 7399 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 7399, Time: 58.586 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 58.586 min. Scan: 7399 Chan: 1 Ion: 1710 us RIC: 6817
Pair Count: 37 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 5780 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 5780, Time: 47.443 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 47.443 min. Scan: 5780 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 176 BC
Pair Count: 11 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
112	$[M]^{++} = C_8H_{16}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula cíclica.
97	$[M - 15]^+ = C_7H_{13}^+$	Perda de metila.
83	$[M - 29]^+ = C_6H_{10}^+$	Perda de etila.
69	$C_5H_9^+$	Perda de propila.
55	$C_4H_7^+$	Perda de butila.

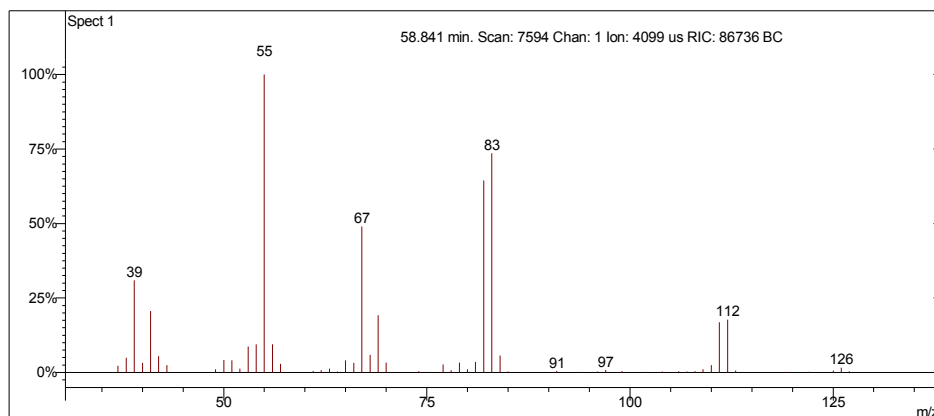
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^+ = 111$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_8H_{16} = C_8H_{15}^+ + CH_3CN$		
$[M-1]^+ = 111$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{++} = CH_2OH^+ + \cdot H$ $CH_2OH^+ + C_8H_{16} = C_8H_{15}^+ + CH_3OH$		

Etilcicloexano

Amostra de Gasolina Comum

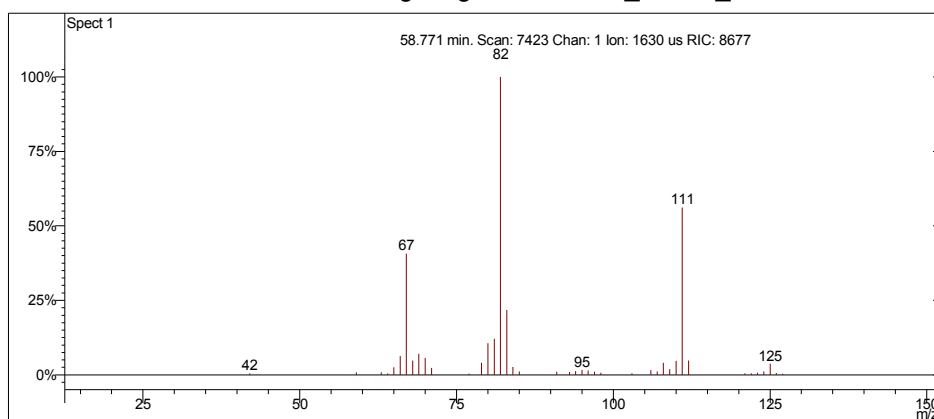
Scan 7594 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 7594, Time: 58.841 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 58.841 min. Scan: 7594 Chan: 1 Ion: 4099 us RIC: 86736 BC
Pair Count: 63 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

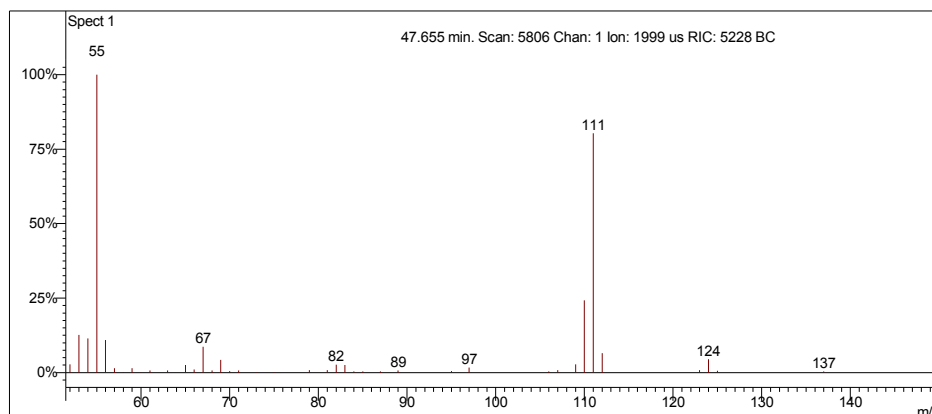
Scan 7423 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 7423, Time: 58.771 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 58.771 min. Scan: 7423 Chan: 1 Ion: 1630 us RIC: 8677
Pair Count: 41 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 5806 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 5806, Time: 47.655 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 47.655 min. Scan: 5806 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 5228 BC
Pair Count: 40 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
112	$[M]^{+} = C_8H_{16}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula cíclica.
97	$[M - 15]^{+} = C_7H_{13}^{+}$	Perda de metila.
67	$C_5H_7^{+}$	Fragmentação do anel.
55	$C_4H_7^{+}$	Perda de butila.

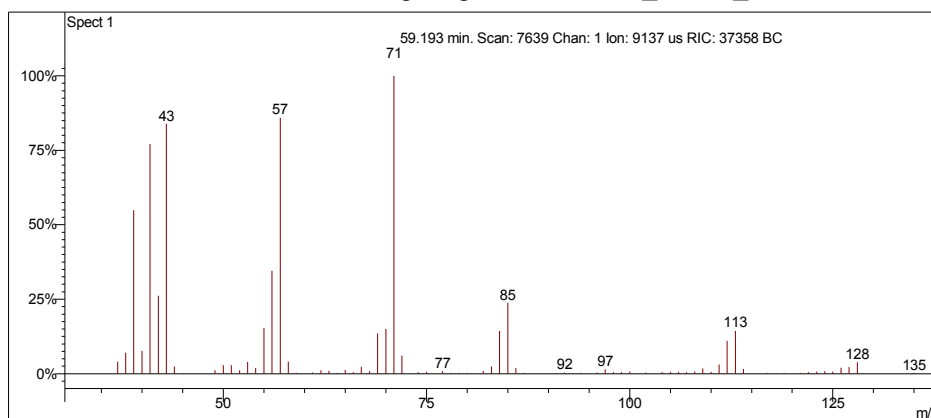
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^{+} = 111$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} = CH_2CN^{+} + \cdot H$ $CH_2CN^{+} + C_8H_{16} = C_8H_{15}^{+} + CH_3CN$		
$[M-1]^{+} = 111$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{+} = CH_2OH^{+} + \cdot H$ $CH_2OH^{+} + C_8H_{16} = C_8H_{15}^{+} + CH_3OH$		

4-etil-2-metilexano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 7639 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 7639, Time: 59.193 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 59.193 min. Scan: 7639 Chan: 1 Ion: 9137 us RIC: 37358 BC
Pair Count: 82 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

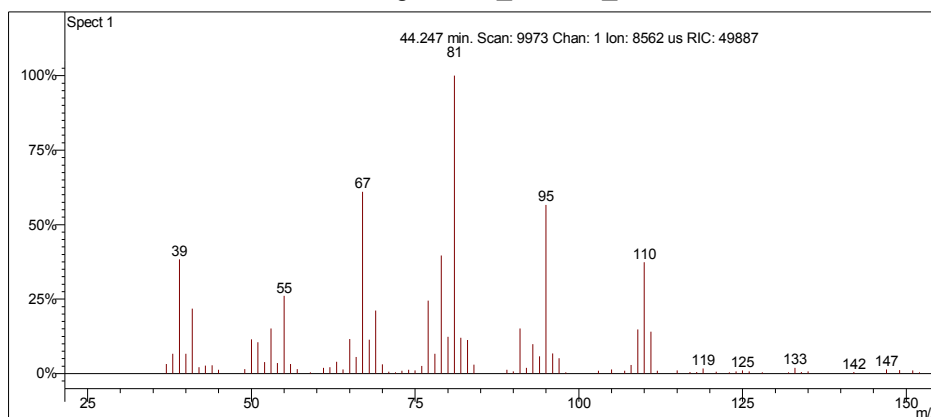
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
128	$[M]^+ = C_9H_{20}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
113	$[M - 15]^+ = C_8H_{15}^+$	Perda de metila.
85	$C_6H_{13}^+$	Perda de Propila.
71	$C_5H_{11}^+$	Perda de butila.
57	$C_4H_9^+$	Fragmentação alílica.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação alílica.

Desconhecido 27

Amostra de Gasolina Comum

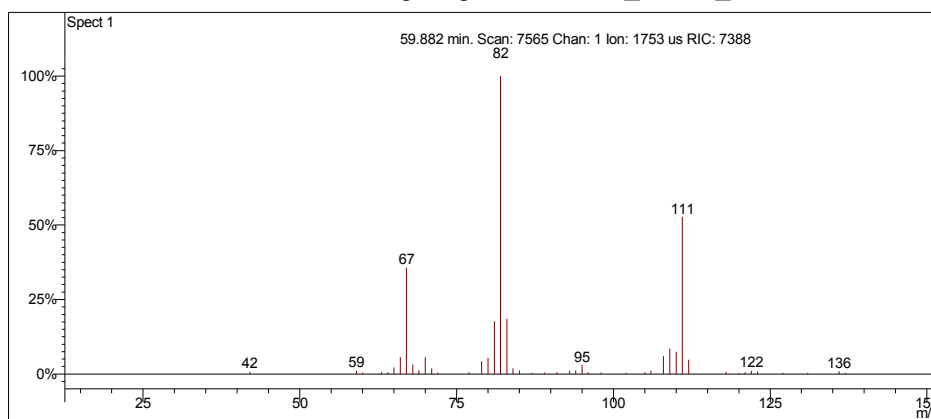
Scan 9973 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_10;52;54 am.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_10;52;54 am.sms
Scan No: 9973, Time: 44.247 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 44.247 min. Scan: 9973 Chan: 1 Ion: 8562 us RIC: 49887
Pair Count: 110 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

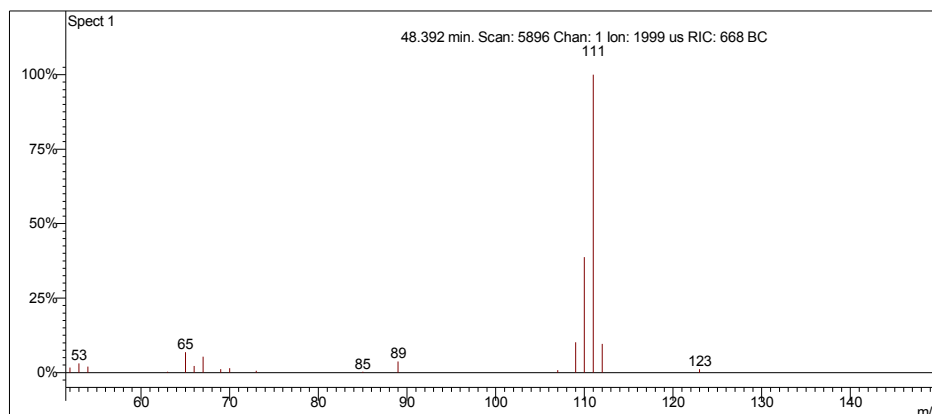
Scan 7565 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciact_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciact_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 7565, Time: 59.882 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 59.882 min. Scan: 7565 Chan: 1 Ion: 1753 us RIC: 7388
Pair Count: 47 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 5896 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 5896, Time: 48.392 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 48.392 min. Scan: 5896 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 668 BC
Pair Count: 18 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
110	$[M]^+ = C_8H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância, confirmado por ionização química.
95	$[M - 15]^+ = C_7H_{11}^+$	Perda de metila. Pico base.
81	$C_6H_9^+$	Fragmentação do anel com rearranjos de hidrogênio.
67	$[M - 43]^+ = C_3H_7^+$	Fragmentação do anel. Perda de propila.
55	$C_4H_7^+$	Fragmentação do anel.
Conclusão: a substância é um olefínico cíclico com 8 carbonos.		

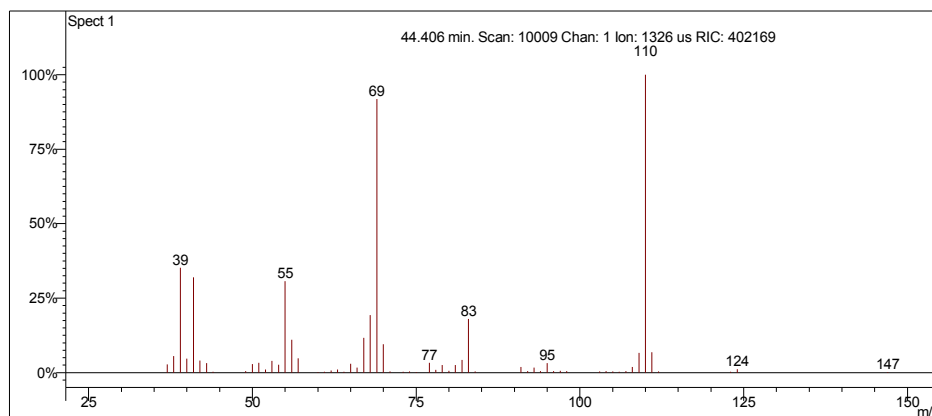
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 111$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_8\text{H}_{14} = \text{C}_8\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 111$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_8\text{H}_{14} = \text{C}_8\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 28

Amostra de Gasolina Comum

Scan 10009 from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_10;52;54 am.sms



Spectrum from c:\... \doutorado\gcomum_11-1-06_10;52;54 am.sms
Scan No: 10009, Time: 44.406 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 44.406 min. Scan: 10009 Chan: 1 Ion: 1326 us RIC: 402169
Pair Count: 71 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

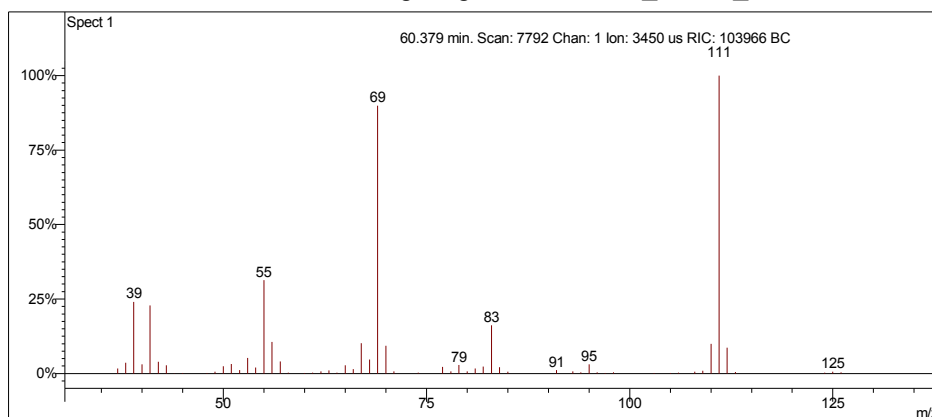
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
110	$[M]^+ = C_8H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância, confirmado por ionização química.
95	$[M - 15]^+ = C_7H_{11}^+$	Perda de metila. Pico base.
83	$C_6H_{11}^+$	Fragmentação do anel com rearranjos de hidrogênio.
69	$C_5H_9^+$	Fragmentação do anel. Perda de propila.
55	$C_4H_7^+$	Fragmentação do anel.
Conclusão: a substância é um olefínico cíclico com 8 carbonos.		

1,1,3-trimetilcicloexano

Amostra de Gasolina Comum

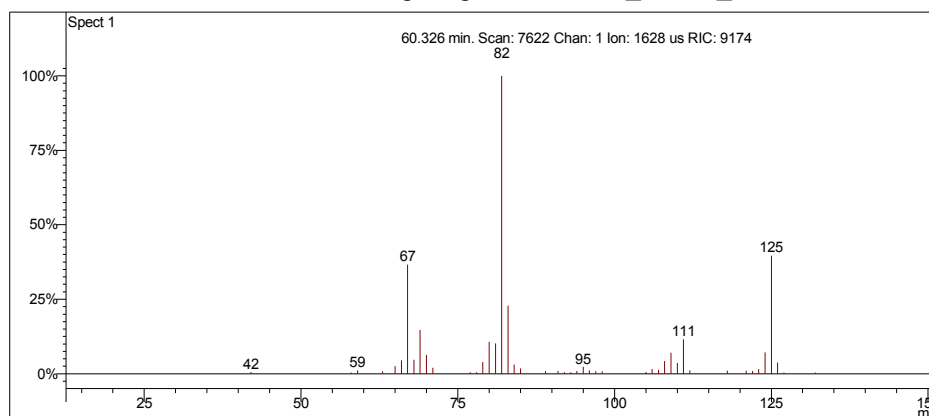
Scan 7792 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 7792, Time: 60.379 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 60.379 min. Scan: 7792 Chan: 1 Ion: 3450 us RIC: 103966 BC
Pair Count: 62 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 7622 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 7622, Time: 60.326 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 60.326 min. Scan: 7622 Chan: 1 Ion: 1628 us RIC: 9174
Pair Count: 46 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
126 (ausente)	$[M]^{+\bullet} = C_9H_{18}^{+\bullet}$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
111	$[M - 15]^+ = C_8H_{15}^+$	Perda de metila. Pico base.
83	$[M - 43]^+ = C_7H_{11}^+$	Perda de propila.
69	$C_5H_9^+$	Perda de butila.
55	$C_4H_7^+$	Perda de pentila.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação do anel.

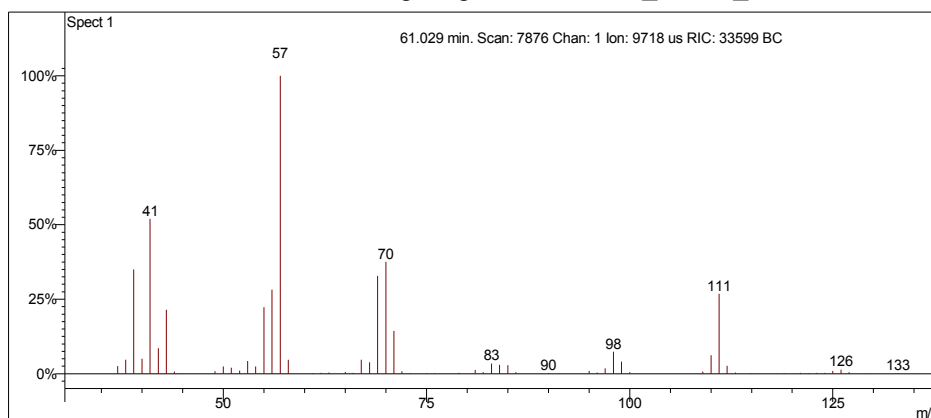
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^+ = 125$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+\bullet} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_9H_{16} = C_9H_{15}^+ + CH_3CN$		
Sem sinal		Metanol
Ionização química instável.		

2,5-dimetileptano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 7876 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 7876, Time: 61.029 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 61.029 min. Scan: 7876 Chan: 1 Ion: 9718 us RIC: 33599 BC
Pair Count: 71 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

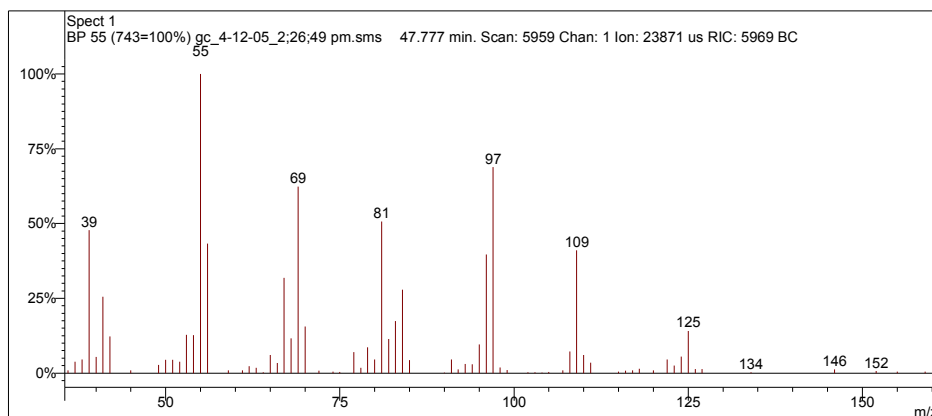
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
128 (ausente)	$[M]^{++} = C_9H_{20}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
111	$[M - 15]^+ = C_8H_{15}^+$	Perda de metano com rearranjo de hidrogênio.
98	$C_7H_{14}^+$	Perda de etano com rearranjo.
70	$C_5H_{10}^+$	Fragmentação alílica.
57	$C_4H_9^+$	Perda de pentila.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação simples.

Desconhecido 29

Amostra de Gasolina Comum

Scan 5959 from c:\... \doutorado\amostras\cgms\gc_4-12-05_2;26;49 pm.sms



Spectrum from c:\... \amostras\cgms\gc_4-12-05_2;26;49 pm.sms
Scan No: 5959, Time: 47.777 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 47.777 min. Scan: 5959 Chan: 1 Ion: 23871 us RIC: 5969 BC
Pair Count: 94 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

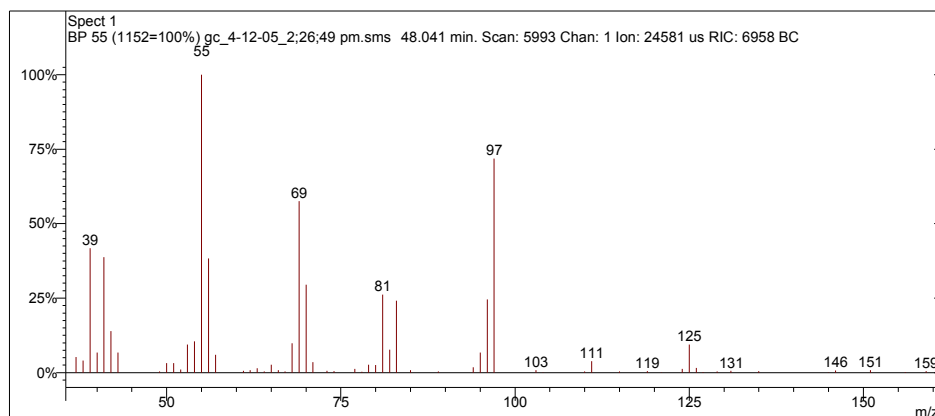
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
126	$[M]^+ = C_9H_{18}^+$	Íon molecular com baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
109	$[M - 17]^+ = C_8H_{13}^+$	Perda de metano com rearranjo de hidrogênio.
97	$[M - 29]^+ = C_7H_{13}^+$	Perda de etila.
81	$C_6H_9^+$	Perda de propano com rearranjo de hidrogênio.
69	$C_5H_9^+$	Perda de butila.
55	$C_4H_7^+$	Fragmentação do anel.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação do anel.
Conclusão: substância é um naftênico ramificado com 9 carbonos.		

Desconhecido 30

Amostra de Gasolina Comum

Scan 5993 from c:\... \doutorado\amostras\cgms\gc_4-12-05_2;26;49 pm.sms



Spectrum from c:\... \amostras\cgms\gc_4-12-05_2;26;49 pm.sms
Scan No: 5993, Time: 48.041 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 48.041 min. Scan: 5993 Chan: 1 Ion: 24581 us RIC: 6958 BC
Pair Count: 80 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

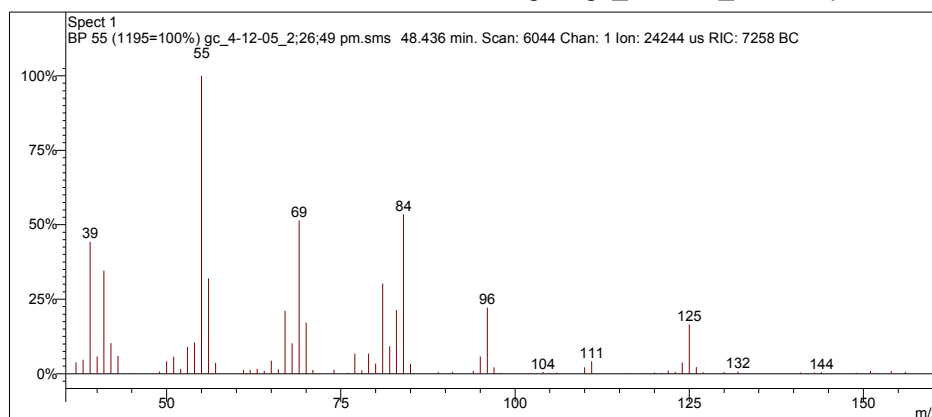
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
126	$[M]^{+} = C_9H_{18}^{+}$	Íon molecular com baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
111	$[M - 15]^{+} = C_8H_{13}^{+}$	Perda de metila.
97	$[M - 29]^{+} = C_7H_{13}^{+}$	Perda de etila.
81	$C_6H_9^{+}$	Perda de propano com rearranjo de hidrogênio.
69	$C_5H_9^{+}$	Perda de butila.
55	$C_4H_7^{+}$	Fragmentação do anel.
41	$C_3H_5^{+}$	Fragmentação do anel.
Conclusão: substância é um naftênico ramificado com 9 carbonos.		

Desconhecido 31

Amostra de Gasolina Comum

Scan 6044 from c:\... \doutorado\amostras\cgms\gc_4-12-05_2;26;49 pm.sms



Spectrum from c:\... \amostras\cgms\gc_4-12-05_2;26;49 pm.sms
Scan No: 6044, Time: 48.436 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 48.436 min. Scan: 6044 Chan: 1 Ion: 24244 us RIC: 7258 BC
Pair Count: 93 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

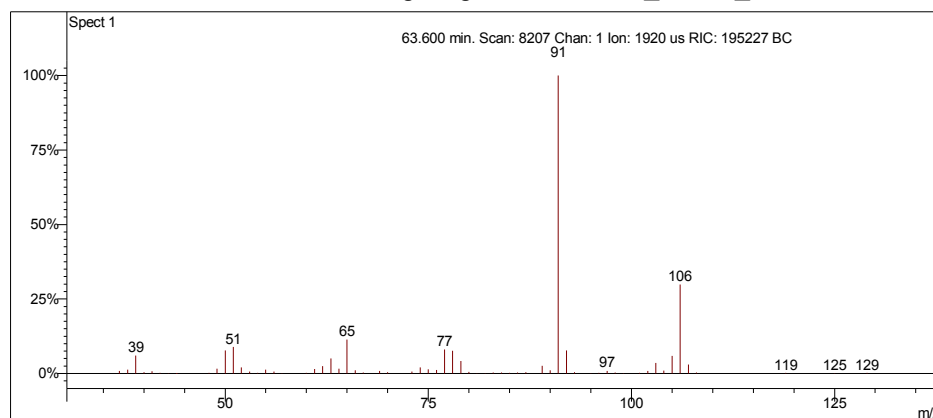
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
126	$[M]^{+} = C_9H_{18}^{+}$	Íon molecular com baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
111	$[M - 15]^{+} = C_8H_{13}^{+}$	Perda de metila.
96	$C_7H_{13}^{+}$	Perda de etano.
84	$C_6H_{12}^{+}$	Perda de C_3H_6 com rearranjo.
69	$C_5H_9^{+}$	Perda de butila.
55	$C_4H_7^{+}$	Fragmentação do anel.
41	$C_3H_5^{+}$	Fragmentação do anel.
Conclusão: substância é um naftênico ramificado com 9 carbonos.		

Etilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

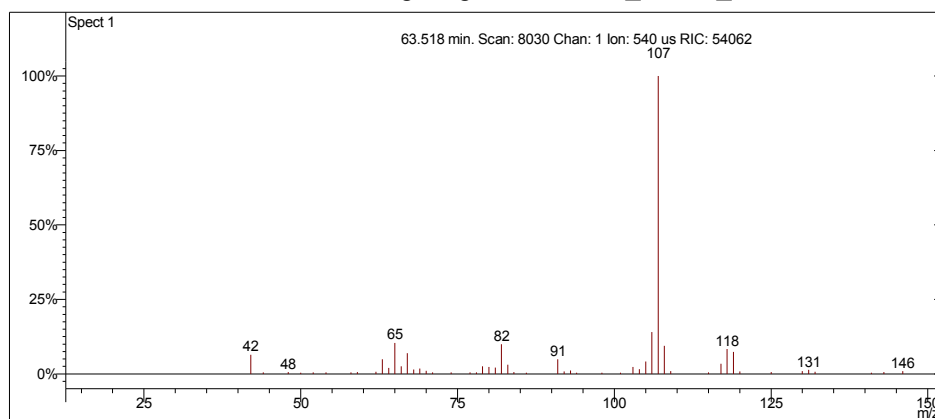
Scan 8207 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 8207, Time: 63.600 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 63.600 min. Scan: 8207 Chan: 1 Ion: 1920 us RIC: 195227 BC
Pair Count: 66 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

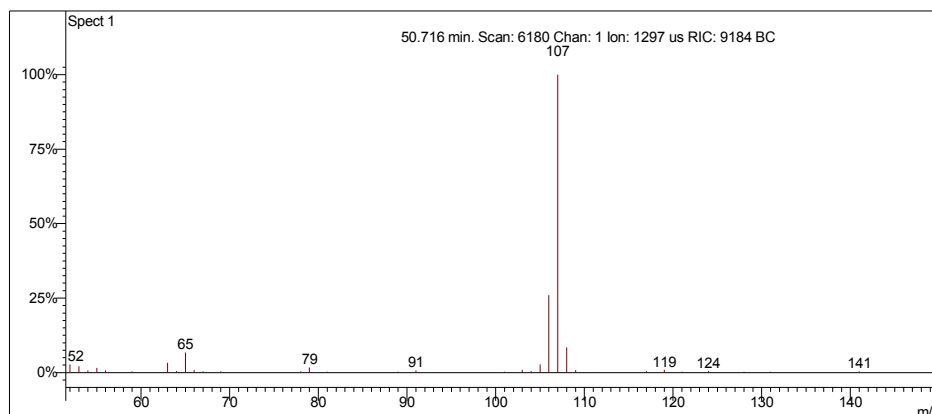
Scan 8030 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 8030, Time: 63.518 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 63.518 min. Scan: 8030 Chan: 1 Ion: 540 us RIC: 54062
Pair Count: 53 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 6180 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 6180, Time: 50.716 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 50.716 min. Scan: 6180 Chan: 1 Ion: 1297 us RIC: 9184 BC
 Pair Count: 35 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
106	$[M]^{++} = C_8H_{10}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
91	$[M - 15]^+ = C_7H_7^+$	Perda de metila e formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.

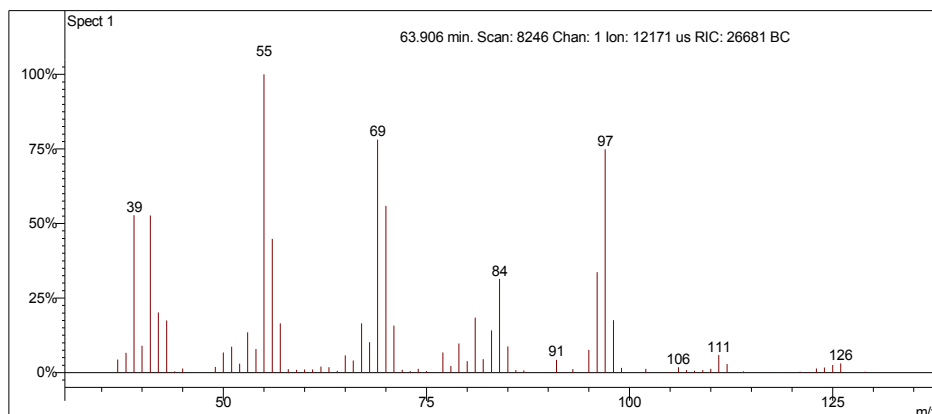
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 107$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_8\text{H}_{10} = \text{C}_8\text{H}_{11}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 107$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_8\text{H}_{10} = \text{C}_8\text{H}_{11}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 32

Amostra de Gasolina Comum

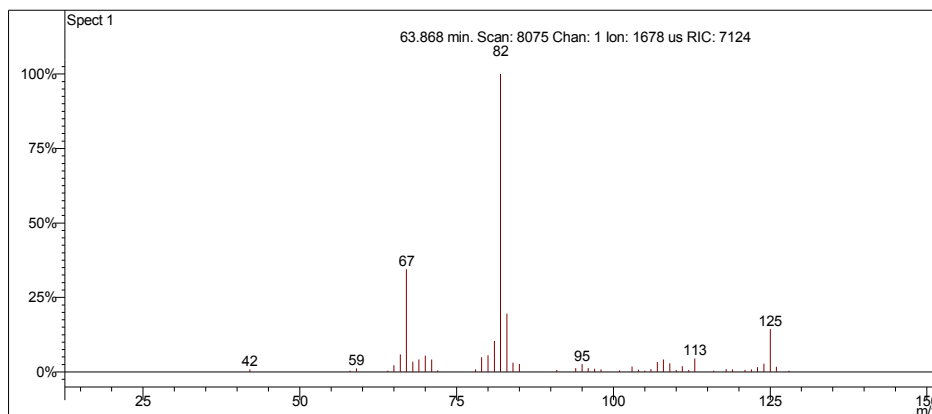
Scan 8246 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 8246, Time: 63.906 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 63.906 min. Scan: 8246 Chan: 1 Ion: 12171 us RIC: 26681 BC
Pair Count: 81 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 8075 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 8075, Time: 63.868 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 63.868 min. Scan: 8075 Chan: 1 Ion: 1678 us RIC: 7124
Pair Count: 48 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
126 (ausente)	$[M]^{+\bullet} = C_9H_{18}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
111	$[M - 15]^+ = C_8H_{15}^+$	Perda de metila. Pico base.
97	$C_7H_{13}^+$	Perda de etila.
84	$C_7H_{12}^+$	Fragmentação do anel com rearranjos de hidrogênio.
69	$C_5H_9^+$	Perda de butila.
55	$C_4H_7^+$	Perda de pentila.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação do anel.
Conclusão: a substância é um naftênico ramificado com 9 carbonos.		

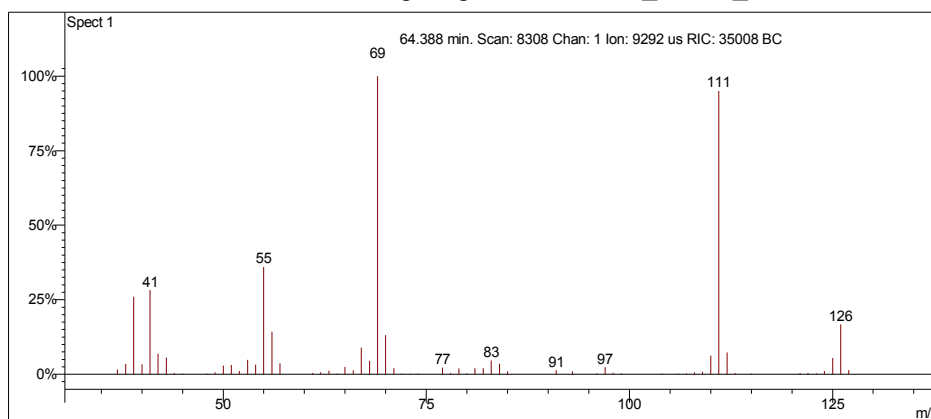
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^+ = 125$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+\bullet} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_9H_{18} = C_9H_{15}^+ + CH_3CN$		
sem sinal		Metanol
Quantidade desprezível.		

(1Z,2E,4E)-1,2,4-trimetilcicloexano

Amostra de Gasolina Comum

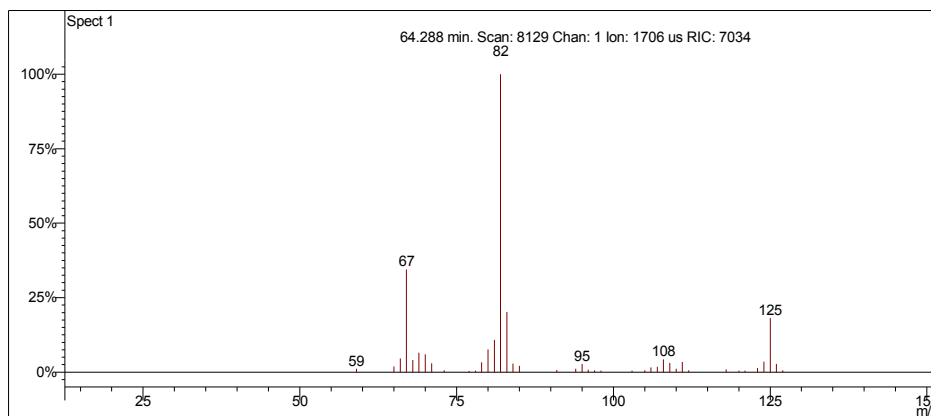
Scan 8308 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 8308, Time: 64.388 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 64.388 min. Scan: 8308 Chan: 1 Ion: 9292 us RIC: 35008 BC
Pair Count: 78 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

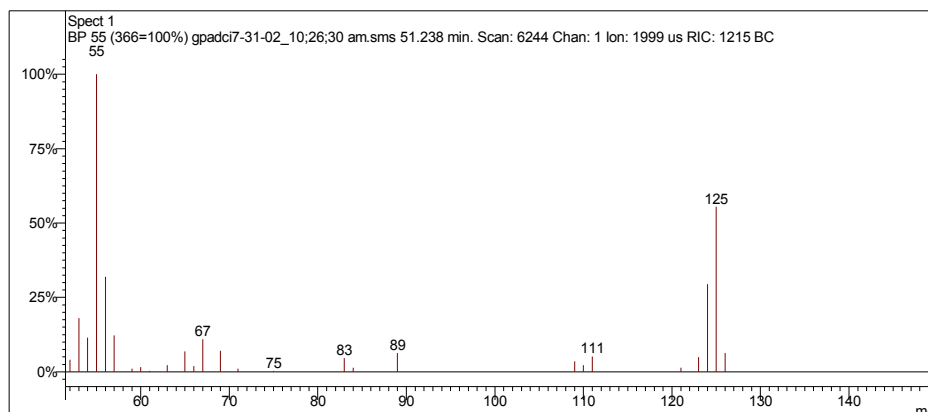
Scan 8129 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 8129, Time: 64.288 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 64.288 min. Scan: 8129 Chan: 1 Ion: 1706 us RIC: 7034
Pair Count: 41 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 6244 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 6244, Time: 51.238 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 51.238 min. Scan: 6244 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1215 BC
Pair Count: 27 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
126 (ausente)	$[M]^+ = C_9H_{18}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
111	$[M - 15]^+ = C_8H_{15}^+$	Perda de metila. Pico base.
83	$C_6H_{11}^+$	Fragmentação do anel com rearranjos de hidrogênio.
69	$C_5H_9^+$	Perda de butila.
55	$C_4H_7^+$	Perda de pentila.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação do anel.

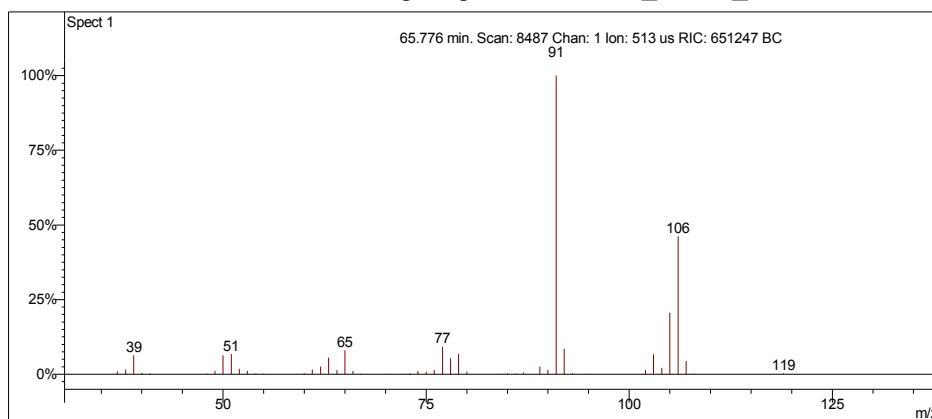
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^+ = 125$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+\bullet} = CH_2CN^+ + \bullet H$ $CH_2CN^+ + C_9H_{18} = C_9H_{17}^+ + CH_3CN$		
$[M-1]^+ = 125$	Abstração de hidreto.	Metanol
$CH_3OH^{+\bullet} = CH_2OH^+ + \bullet H$ $CH_2OH^+ + C_9H_{18} = C_9H_{17}^+ + CH_3OH$		

1,3-dimetilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

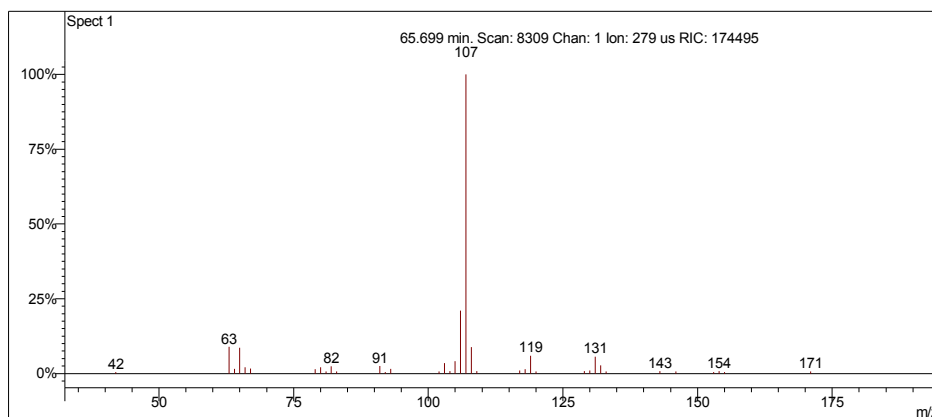
Scan 8487 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 8487, Time: 65.776 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 65.776 min. Scan: 8487 Chan: 1 Ion: 513 us RIC: 651247 BC
Pair Count: 51 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

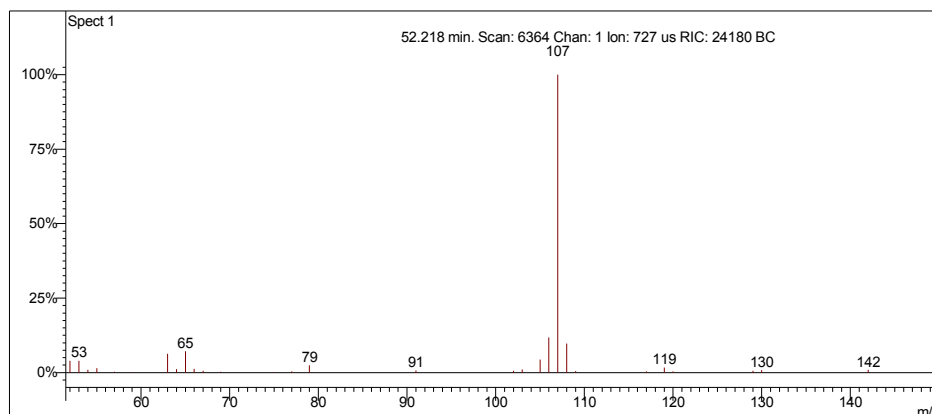
Scan 8309 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 8309, Time: 65.699 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 65.699 min. Scan: 8309 Chan: 1 Ion: 279 us RIC: 174495
Pair Count: 37 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 6364 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 6364, Time: 52.218 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 52.218 min. Scan: 6364 Chan: 1 Ion: 727 us RIC: 24180 BC
Pair Count: 38 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
106	$[M]^+ = C_8H_{10}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
91	$[M - 15]^+ = C_7H_7^+$	Perda de metila e formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.

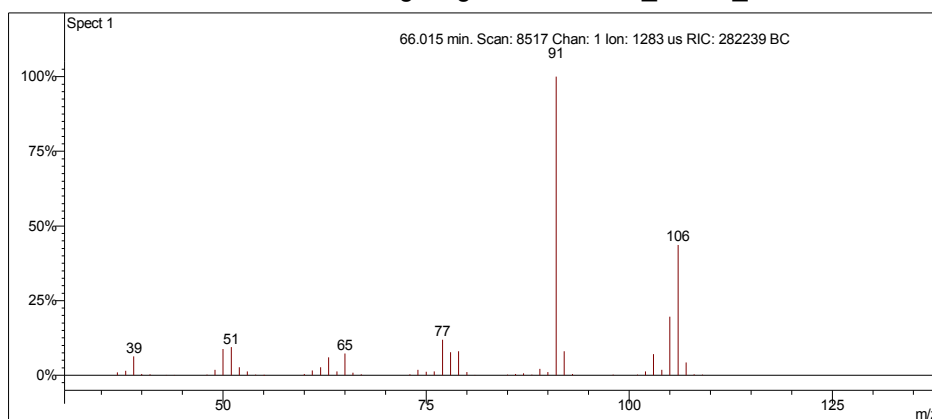
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 107$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\bullet} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \bullet\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_8\text{H}_{10} = \text{C}_8\text{H}_{11}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 107$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\bullet} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \bullet\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_8\text{H}_{10} = \text{C}_8\text{H}_{11}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

1,4-dimetilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

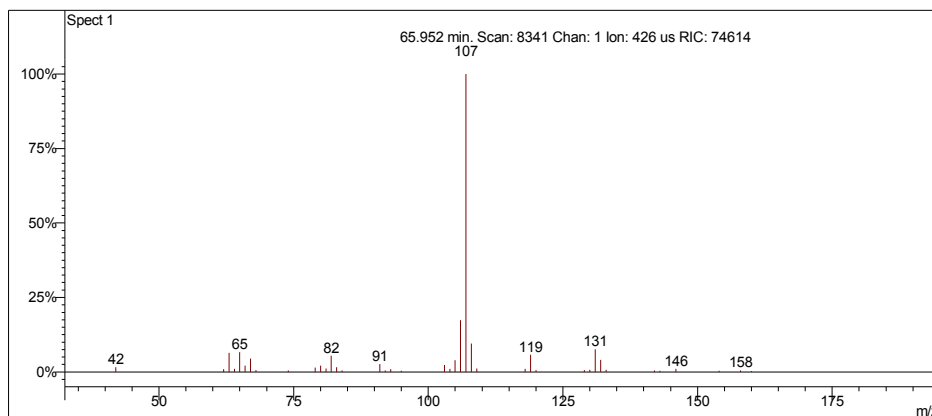
Scan 8517 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 8517, Time: 66.015 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 66.015 min. Scan: 8517 Chan: 1 Ion: 1283 us RIC: 282239 BC
Pair Count: 52 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

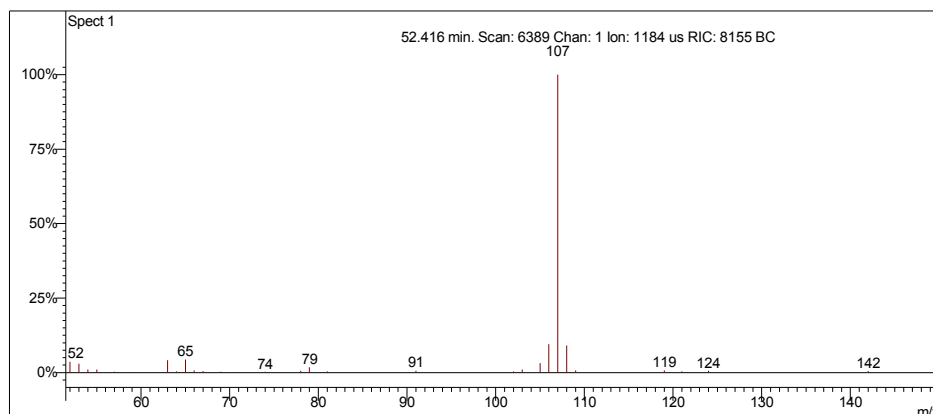
Scan 8341 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 8341, Time: 65.952 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 65.952 min. Scan: 8341 Chan: 1 Ion: 426 us RIC: 74614
Pair Count: 40 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 6389 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 6389, Time: 52.416 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 52.416 min. Scan: 6389 Chan: 1 Ion: 1184 us RIC: 8155 BC
Pair Count: 33 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
106	$[M]^+ = C_8H_{10}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
91	$[M - 15]^+ = C_7H_7^+$	Perda de metila e formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.

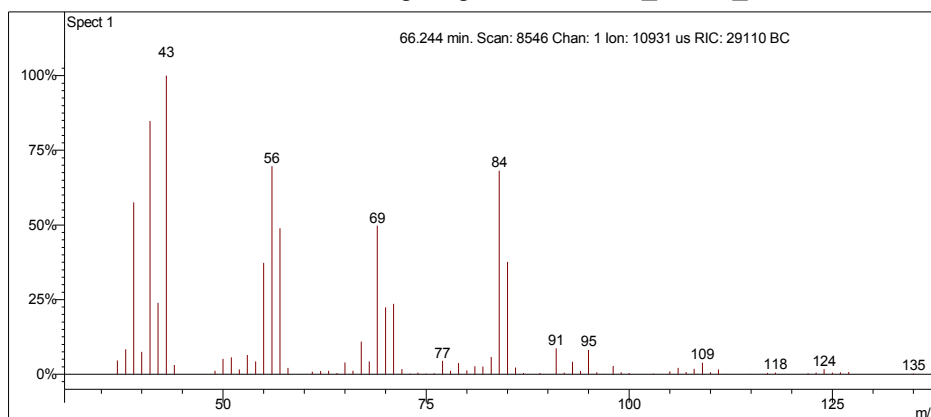
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 107$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\bullet} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_8\text{H}_{10} = \text{C}_8\text{H}_{11}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 107$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\bullet} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_8\text{H}_{10} = \text{C}_8\text{H}_{11}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

2,3-dimetileptano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 8546 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 8546, Time: 66.244 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 66.244 min. Scan: 8546 Chan: 1 Ion: 10931 us RIC: 29110 BC
Pair Count: 84 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

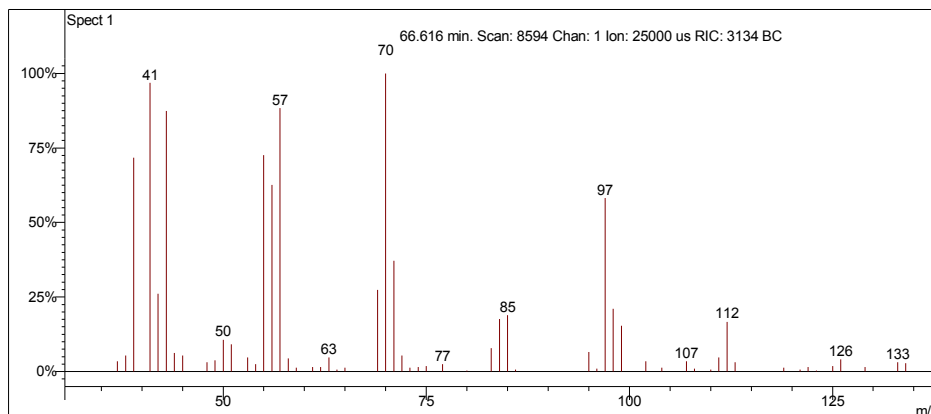
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
128 (ausente)	$[M]^+ = C_9H_{20}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
69	$C_5H_9^+$	Perda de butano com rearranjo de hidrogênio.
56	$C_4H_8^+$	Perda de pentano.
43	$C_3H_7^+$	Fragmentação alílica.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação alílica.

3,4-dimetileptano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 8594 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 8594, Time: 66.616 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 66.616 min. Scan: 8594 Chan: 1 Ion: 25000 us RIC: 3134 BC
Pair Count: 78 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

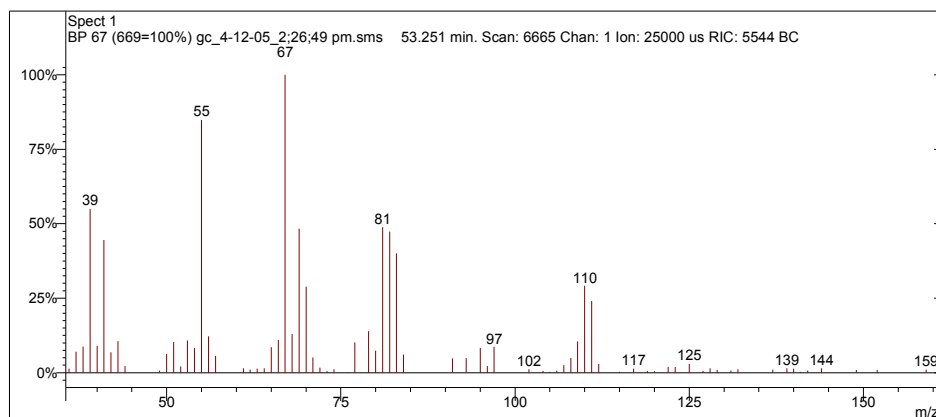
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
128 (ausente)	$[M]^+ = C_9H_{20}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
112	$[M - 15]^+ = C_8H_{16}^+$	Perda de metila com rearranjo de hidrogênio.
97	$C_7H_{13}^+$	Perda de etano.
70	$C_5H_{10}^+$	Perda de propano.
57	$C_4H_9^+$	Perda de pentila.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação alílica.

Desconhecido 33

Amostra de Gasolina Comum

Scan 6665 from c:\... \doutorado\amostras\cgms\gc_4-12-05_2;26;49 pm.sms



Spectrum from c:\... \amostras\cgms\gc_4-12-05_2;26;49 pm.sms
Scan No: 6665, Time: 53.251 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 53.251 min. Scan: 6665 Chan: 1 Ion: 25000 us RIC: 5544 BC
Pair Count: 92 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

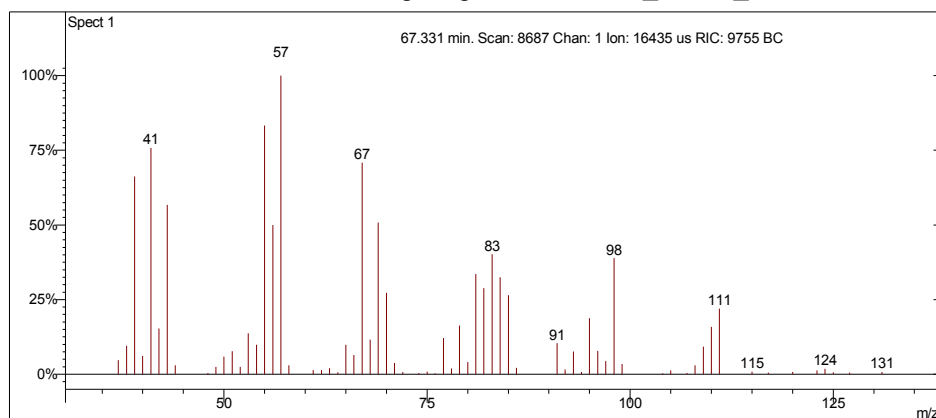
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
126	$[M]^+ = C_9H_{18}^+$	Íon molecular com baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
110	$C_8H_{14}^+$	Perda de metano.
97	$C_7H_{13}^+$	Perda de etila.
81	$C_6H_9^+$	Perda de propano com rearranjo.
67	$C_5H_7^+$	Perda de butano com rearranjo.
55	$C_4H_7^+$	Fragmentação do anel.
Conclusão: substância é um naftênico ramificado com 9 carbonos.		

3-etil-3-metilexano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 8687 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
 Scan No: 8687, Time: 67.331 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 67.331 min. Scan: 8687 Chan: 1 Ion: 16435 us RIC: 9755 BC
 Pair Count: 81 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

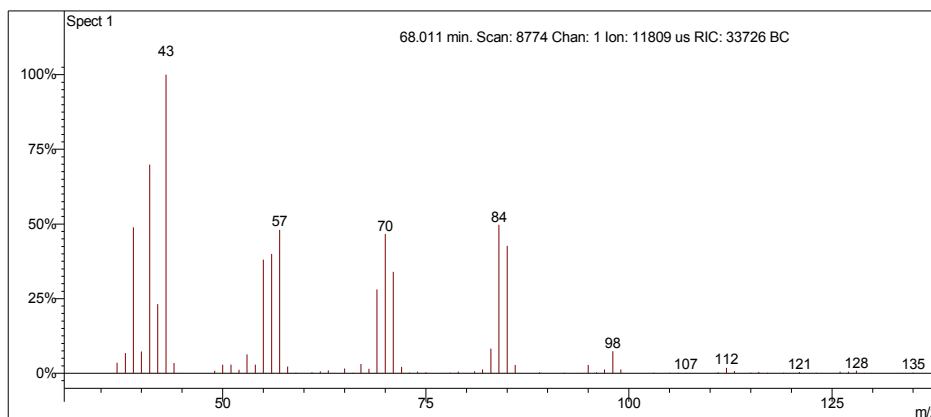
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
128 (ausente)	$[M]^+ = C_9H_{20}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
111	$[M - 15]^+ = C_8H_{15}^+$	Perda de metila com rearranjo de hidrogênio.
98	$C_7H_{14}^+$	Perda de etano.
83	$C_6H_{11}^+$	Perda de propano com rearranjo de hidrogênio.
67	$C_5H_7^+$	Fragmentação alílica.
57	$C_4H_9^+$	Fragmentação alílica.

4-metiloctano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 8774 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 8774, Time: 68.011 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 68.011 min. Scan: 8774 Chan: 1 Ion: 11809 us RIC: 33726 BC
Pair Count: 78 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

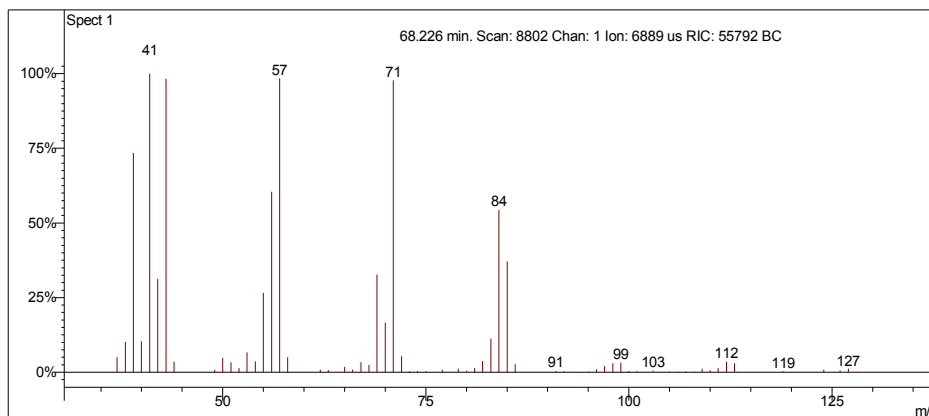
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
128 (ausente)	$[M]^+ = C_9H_{20}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
112	$[M - 15]^+ = C_8H_{16}^+$	Perda de metila com rearranjo de hidrogênio.
98	$C_7H_{14}^+$	Perda de etano.
84	$C_6H_{12}^+$	Perda de propano.
70	$C_5H_{10}^+$	Fragmentação alílica.
57	$C_4H_9^+$	Fragmentação alílica.

2-metiloctano

]Amostra de Gasolina Comum

Scan 8802 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 8802, Time: 68.226 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 68.226 min. Scan: 8802 Chan: 1 Ion: 6889 us RIC: 55792 BC
Pair Count: 71 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

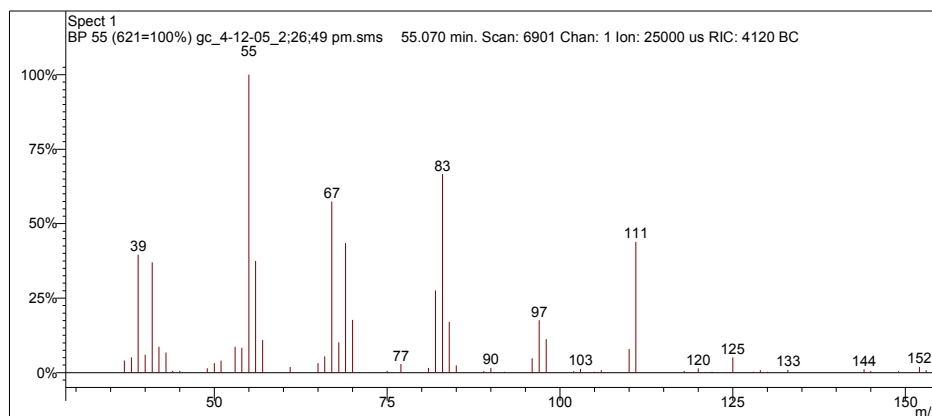
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
128 (ausente)	$[M]^{+•} = C_9H_{20}^{+•}$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
112	$[M - 15]^{+•} = C_8H_{16}^{+•}$	Perda de metila com rearranjo de hidrogênio.
98	$C_7H_{14}^{+•}$	Perda de etano.
84	$C_6H_{12}^{+•}$	Perda de propano.
70	$C_5H_{10}^{+•}$	Fragmentação alílica.
57	$C_4H_9^{+•}$	Fragmentação alílica.

Desconhecido 34

Amostra de Gasolina Comum

Scan 6901 from c:\... \doutorado\amostras\cgms\gc_4-12-05_2;26;49 pm.sms



Spectrum from c:\... \amostras\cgms\gc_4-12-05_2;26;49 pm.sms
Scan No: 6901, Time: 55.070 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 55.070 min. Scan: 6901 Chan: 1 Ion: 25000 us RIC: 4120 BC
Pair Count: 83 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

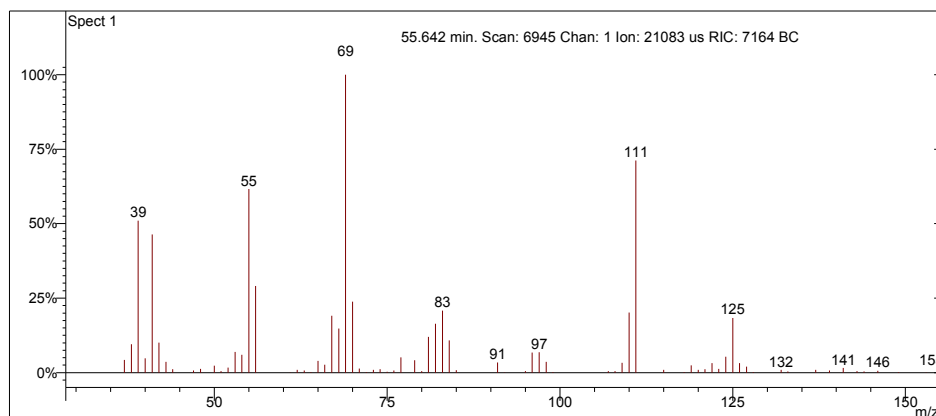
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
126	$[M]^+ = C_9H_{18}^+$	Íon molecular com baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
111	$[M - 15]^+ = C_8H_{13}^+$	Perda de metila.
97	$[M - 29]^+ = C_7H_{13}^+$	Perda de etila.
83	$C_6H_{11}^+$	Perda de propila.
67	$C_5H_7^+$	Perda de butano com rearranjo.
55	$C_4H_7^+$	Fragmentação do anel.
Conclusão: substância é um naftênico ramificado com 9 carbonos.		

Desconhecido 35

Amostra de Gasolina Comum

Scan 6945 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 6945, Time: 55.642 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 55.642 min. Scan: 6945 Chan: 1 Ion: 21083 us RIC: 7164 BC
Pair Count: 104 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

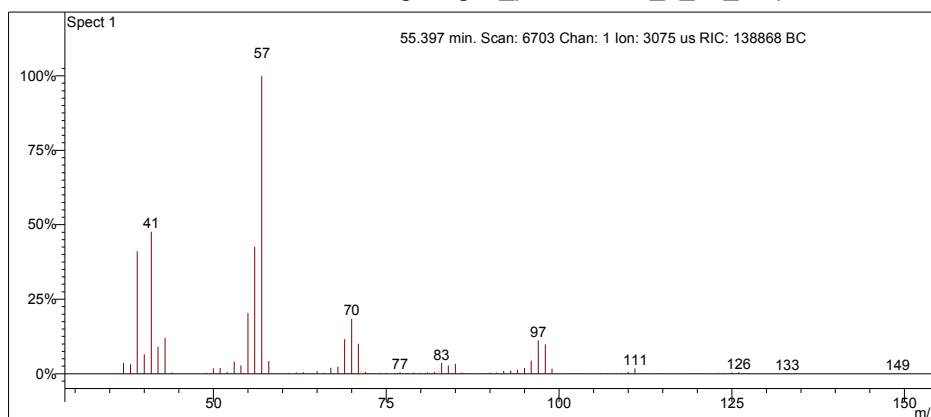
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
126	$[M]^{+} = C_9H_{18}^{+}$	Íon molecular com baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
111	$[M - 15]^{+} = C_8H_{13}^{+}$	Perda de metila.
97	$[M - 29]^{+} = C_7H_{13}^{+}$	Perda de etila.
83	$C_6H_{11}^{+}$	Perda de propila.
69	$C_5H_9^{+}$	Perda de butila.
55	$C_4H_7^{+}$	Fragmentação do anel.
Conclusão: substância é um naftênico ramificado com 9 carbonos.		

Desconhecido 36

Amostra de Gasolina Comum

Scan 6703 from c:\... \amostras\cgms\gas_pad7-30-02_1_26_25 pm.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gas_pad7-30-02_1_26_25 pm.sms
Scan No: 6703, Time: 55.397 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 55.397 min. Scan: 6703 Chan: 1 Ion: 3075 us RIC: 138868 BC
Pair Count: 77 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

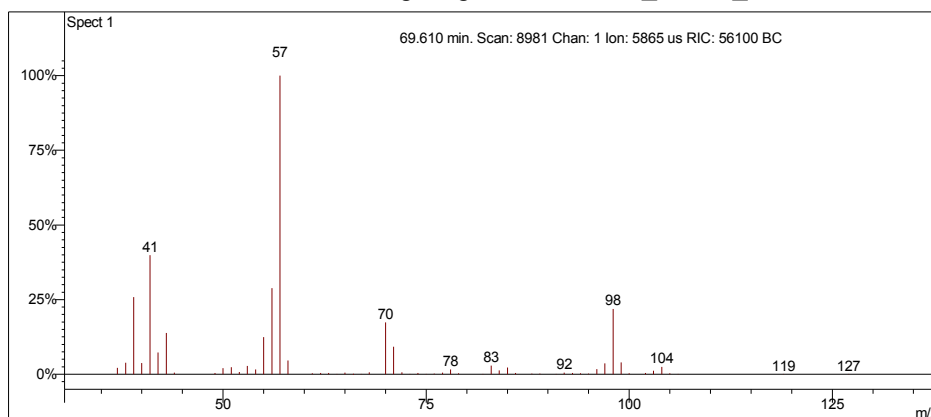
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
126	$[M]^{+} = C_9H_{18}^{+}$	Íon molecular com baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
111	$[M - 15]^{+} = C_8H_{13}^{+}$	Perda de metila.
97	$[M - 29]^{+} = C_7H_{13}^{+}$	Perda de etila.
83	$C_6H_{11}^{+}$	Perda de propila.
70	$C_5H_9^{+}$	Perda de butano.
57	$C_4H_9^{+}$	Fragmentação alílica com rearranjo.
Conclusão: substância é um isoparafínico com 9 carbonos.		

3-etileptano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 8981 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 8981, Time: 69.610 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 69.610 min. Scan: 8981 Chan: 1 Ion: 5865 us RIC: 56100 BC
Pair Count: 63 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

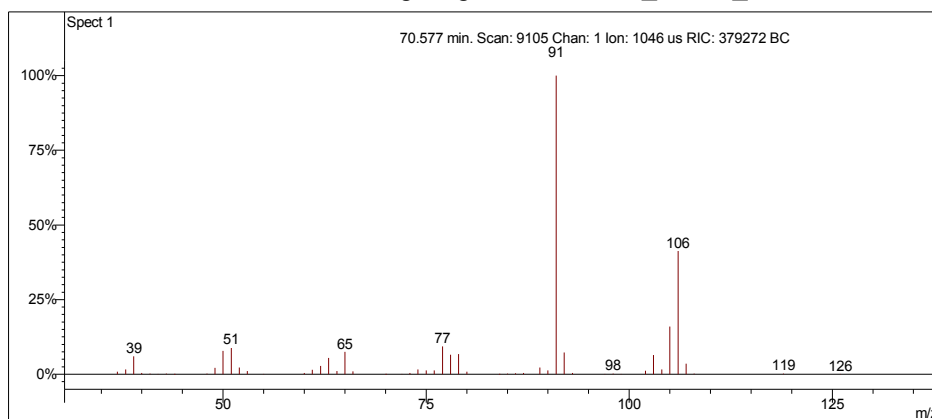
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
128 (ausente)	$[M]^{++} = C_9H_{20}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
98	$C_7H_{14}^+$	Perda de etano.
70	$C_5H_{10}^+$	Perda de butano.
57	$C_4H_9^+$	Perda de pentila.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação alílica.

1,2-dimetilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

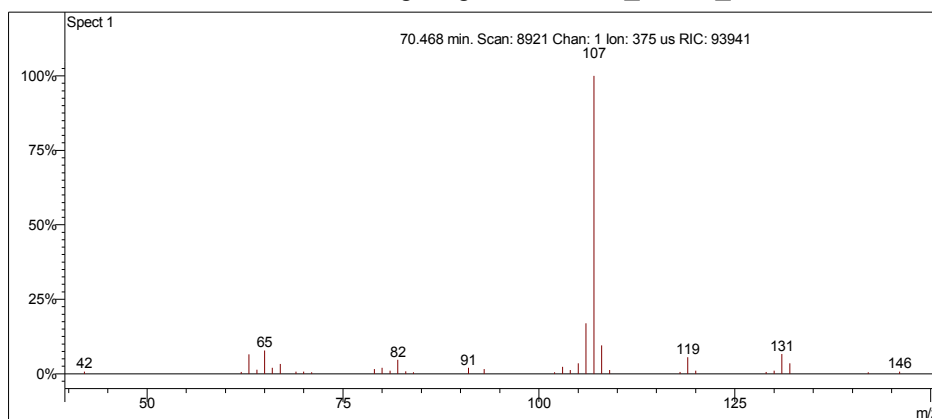
Scan 9105 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 9105, Time: 70.577 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 70.577 min. Scan: 9105 Chan: 1 Ion: 1046 us RIC: 379272 BC
Pair Count: 57 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

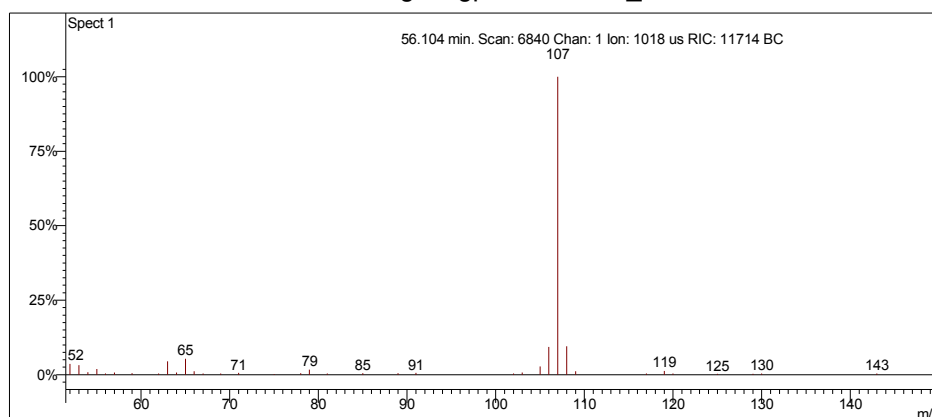
Scan 8921 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 8921, Time: 70.468 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 70.468 min. Scan: 8921 Chan: 1 Ion: 375 us RIC: 93941
Pair Count: 35 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 6840 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 6840, Time: 56.104 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 56.104 min. Scan: 6840 Chan: 1 Ion: 1018 us RIC: 11714 BC
Pair Count: 39 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
106	$[M]^+ = C_8H_{10}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
91	$[M - 15]^+ = C_7H_7^+$	Perda de metila e formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.

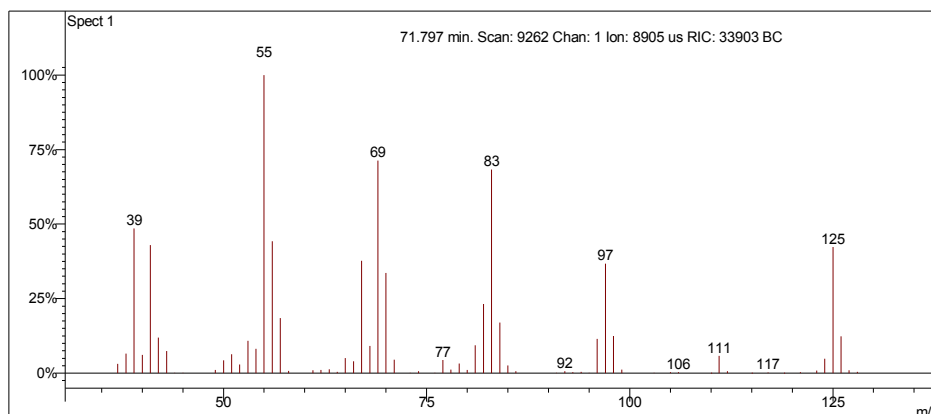
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 107$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_8\text{H}_{10} = \text{C}_8\text{H}_{11}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 107$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_8\text{H}_{10} = \text{C}_8\text{H}_{11}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

1,1,2-trimetilcicloexano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 9262 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 9262, Time: 71.797 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 71.797 min. Scan: 9262 Chan: 1 Ion: 8905 us RIC: 33903 BC
Pair Count: 74 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

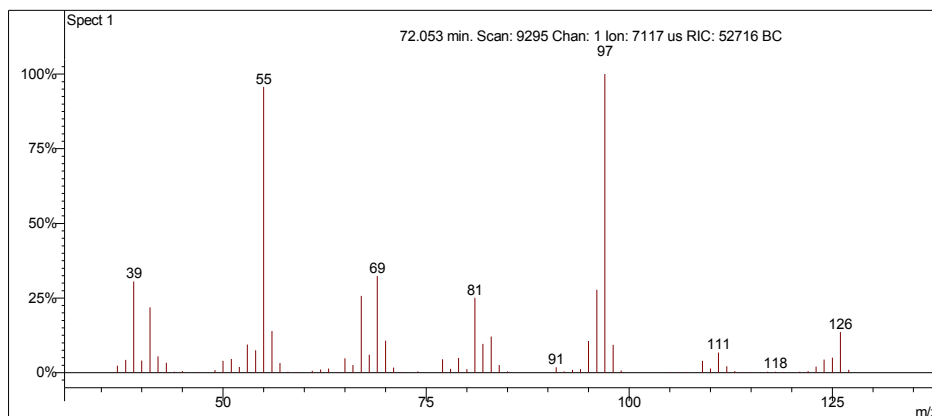
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
126	$[M]^+ = C_9H_{18}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
111	$[M - 15]^+ = C_8H_{15}^+$	Perda de metila. Pico base.
97	$[M - 29]^+ = C_7H_{13}^+$	Perda de etila.
83	$C_6H_{11}^+$	Fragmentação do anel com rearranjos de hidrogênio.
69	$C_5H_9^+$	Perda de butila.
55	$C_4H_7^+$	Perda de pentila.

(E)-1-etil-4-metilcicloexano

Amostra de Gasolina Comum

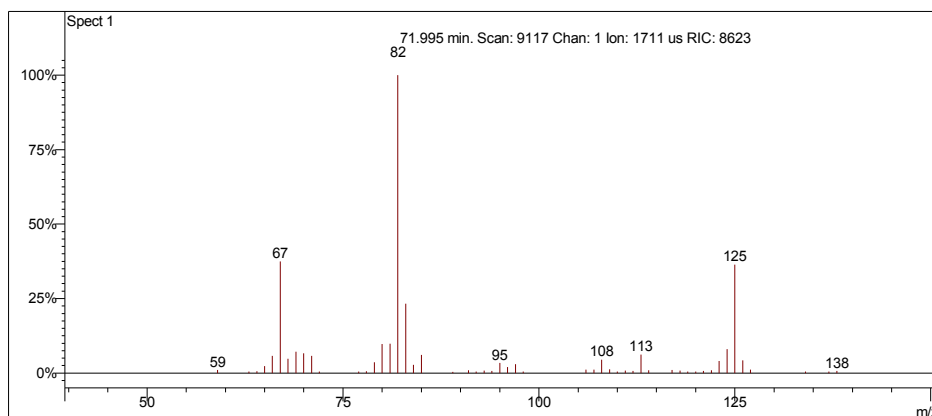
Scan 9295 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 9295, Time: 72.053 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 72.053 min. Scan: 9295 Chan: 1 Ion: 7117 us RIC: 52716 BC
Pair Count: 77 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 9117 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 9117, Time: 71.995 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 71.995 min. Scan: 9117 Chan: 1 Ion: 1711 us RIC: 8623
Pair Count: 52 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
126	$[M]^+ = C_9H_{18}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
111	$[M - 15]^+ = C_8H_{15}^+$	Perda de metila. Pico base.
97	$C_7H_{13}^+$	Perda de etila.
81	$C_6H_9^+$	Fragmentação do anel com rearranjos de hidrogênio.
69	$C_5H_9^+$	Perda de propila.
55	$C_4H_7^+$	Perda de butila.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação do anel.

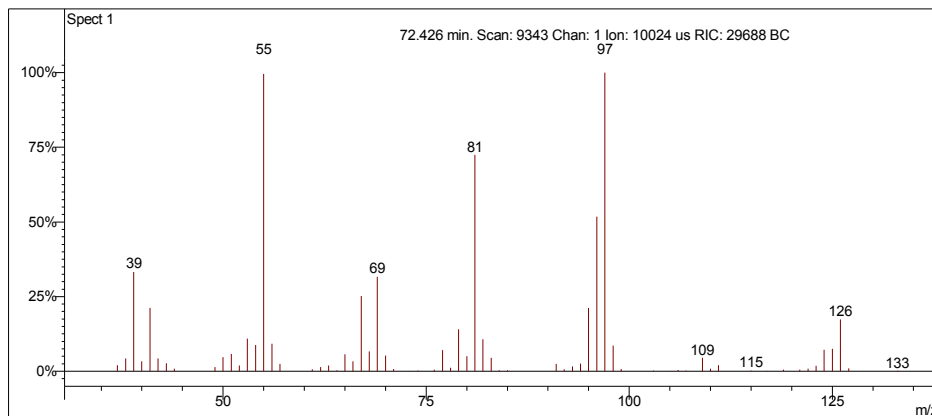
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^+ = 125$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} = CH_2CN^+ + \cdot H$ $CH_2CN^+ + C_9H_{18} = C_9H_{17}^+ + CH_3CN$		
Sem sinal		Metanol
Ionização química instável.		

(Z)-1-etil-4-metilcicloexano

Amostra de Gasolina Comum

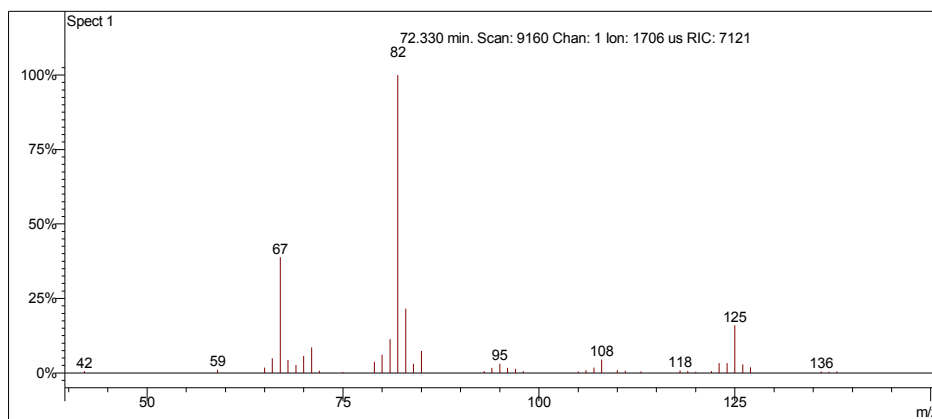
Scan 9343 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 9343, Time: 72.426 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 72.426 min. Scan: 9343 Chan: 1 Ion: 10024 us RIC: 29688 BC
Pair Count: 74 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 9160 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 9160, Time: 72.330 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 72.330 min. Scan: 9160 Chan: 1 Ion: 1706 us RIC: 7121
Pair Count: 44 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
126 (ausente)	$[M]^{+} = C_9H_{18}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
97	$C_7H_{13}^{+}$	Perda de etila. Pico base.
81	$C_6H_9^{+}$	Fragmentação do anel com rearranjos de hidrogênio.
69	$C_5H_9^{+}$	Perda de propila.
55	$C_4H_7^{+}$	Perda de butila.
41	$C_3H_5^{+}$	Fragmentação do anel.

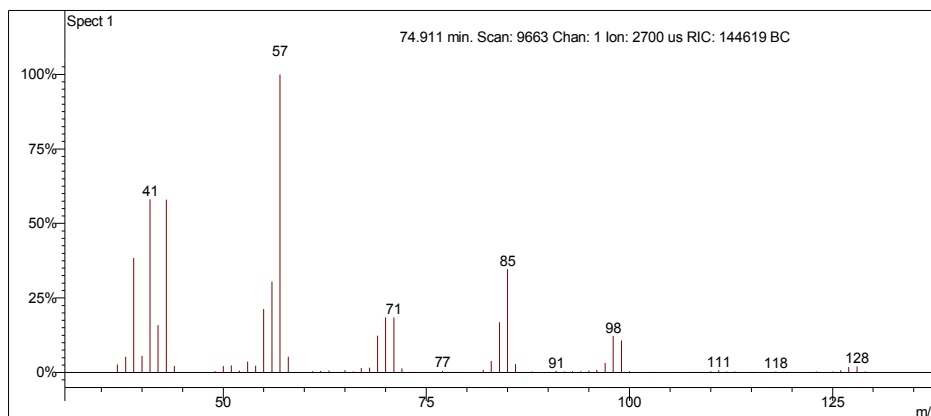
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^{+} = 125$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} = CH_2CN^{+} + \cdot H$ $CH_2CN^{+} + C_9H_{18} = C_9H_{17}^{+} + CH_3CN$		
Sem sinal		Metanol
Ionização química instável.		

Nonano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 9663 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 9663, Time: 74.911 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 74.911 min. Scan: 9663 Chan: 1 Ion: 2700 us RIC: 144619 BC
Pair Count: 76 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

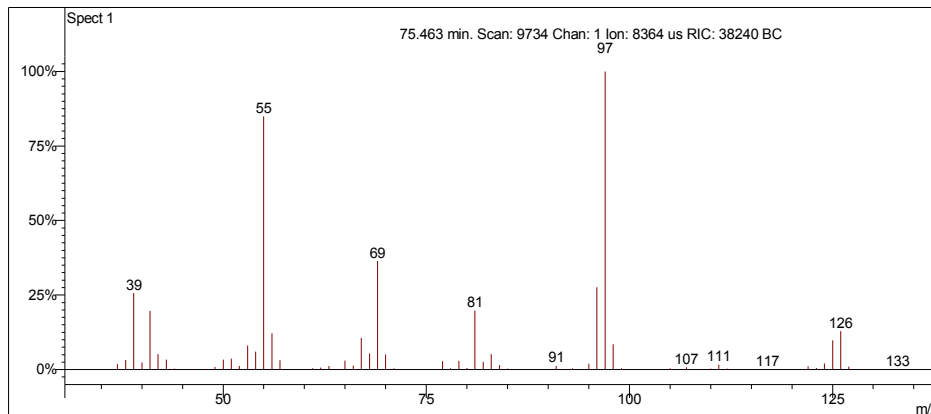
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
128	$[M]^{+} = C_9H_{20}^{+}$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
98	$C_7H_{14}^{+}$	Perda de etano.
71	$C_5H_{11}^{+}$	Perda de propila.
57	$C_4H_9^{+}$	Perda de butila.
41	$C_3H_5^{+}$	Fragmentação alílica.

1-metil-2-propilciclopentano

Amostra de Gasolina Comum

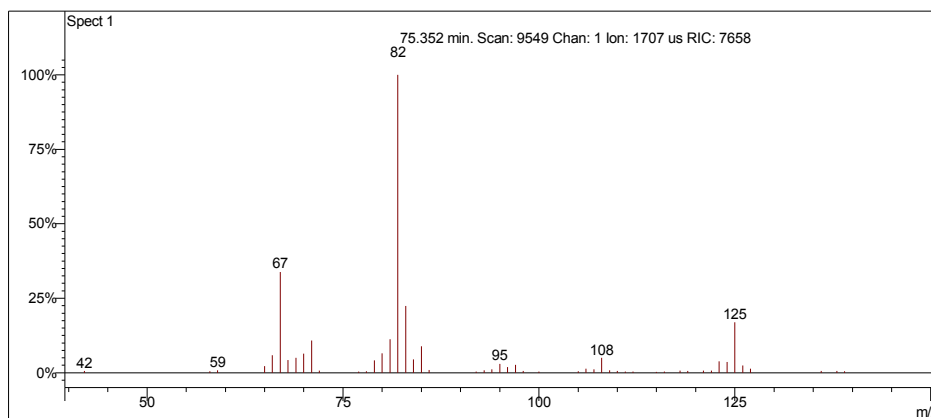
Scan 9734 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 9734, Time: 75.463 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 75.463 min. Scan: 9734 Chan: 1 Ion: 8364 us RIC: 38240 BC
Pair Count: 72 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 9549 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 9549, Time: 75.352 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 75.352 min. Scan: 9549 Chan: 1 Ion: 1707 us RIC: 7658
Pair Count: 52 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
126	$[M]^+ = C_9H_{18}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
97	$C_7H_{13}^+$	Perda de etila.
81	$C_6H_9^+$	Fragmentação do anel com rearranjos de hidrogênio.
69	$C_5H_9^+$	Perda de propila.
55	$C_4H_7^+$	Perda de butila.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação do anel.

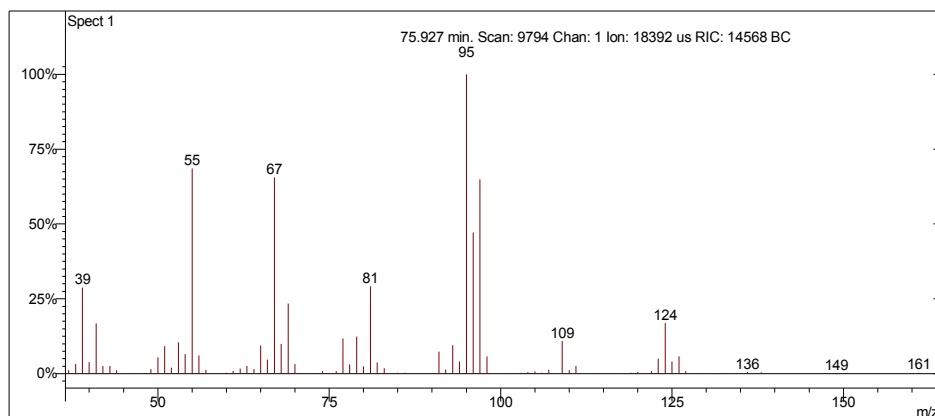
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^+ = 125$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+\bullet} = CH_2CN^+ + \bullet H$ $CH_2CN^+ + C_9H_{18} = C_9H_{17}^+ + CH_3CN$		
sem sinal		Metanol
Quantidade desprezível.		

Desconhecido 37

Amostra de Gasolina Comum

Scan 9794 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
 Scan No: 9794, Time: 75.927 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 75.927 min. Scan: 9794 Chan: 1 Ion: 18392 us RIC: 14568 BC
 Pair Count: 86 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

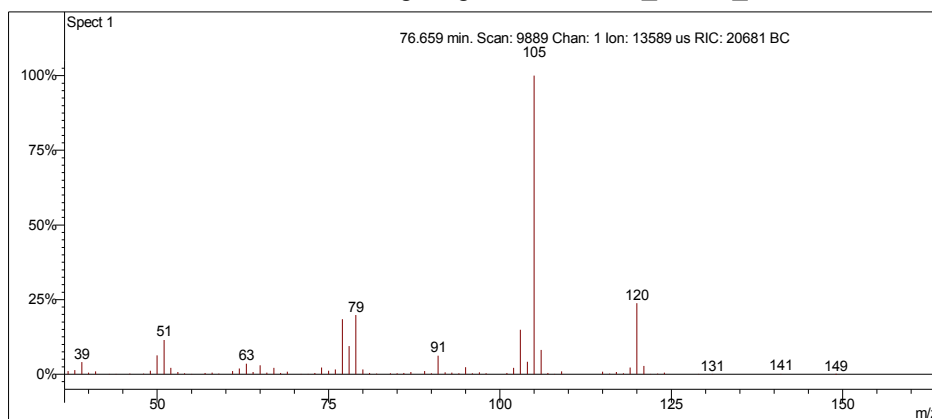
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
124	$[M]^+ = C_9H_{16}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula cíclica ou com ressonância.
109	$[M - 15]^+ = C_8H_{13}^+$	Perda de metila.
95	$C_7H_{11}^+$	Perda de etila.
81	$C_6H_9^+$	Fragmentação do anel com rearranjos de hidrogênio.
67	$C_5H_7^+$	Fragmentação do anel com rearranjos de hidrogênio.
55	$C_4H_7^+$	Fragmentação do anel com rearranjos de hidrogênio.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação do anel.
Conclusão: a substância é um naftênico ramificado com 9 carbonos.		

Isopropilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

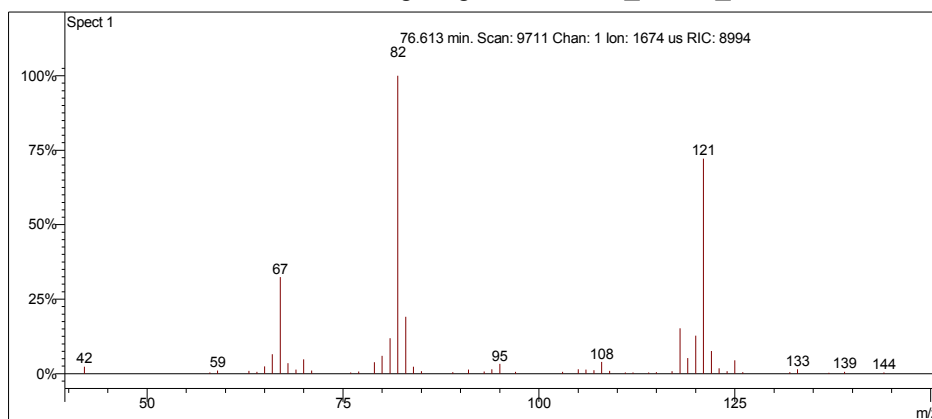
Scan 9889 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 9889, Time: 76.659 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 76.659 min. Scan: 9889 Chan: 1 Ion: 13589 us RIC: 20681 BC
Pair Count: 79 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

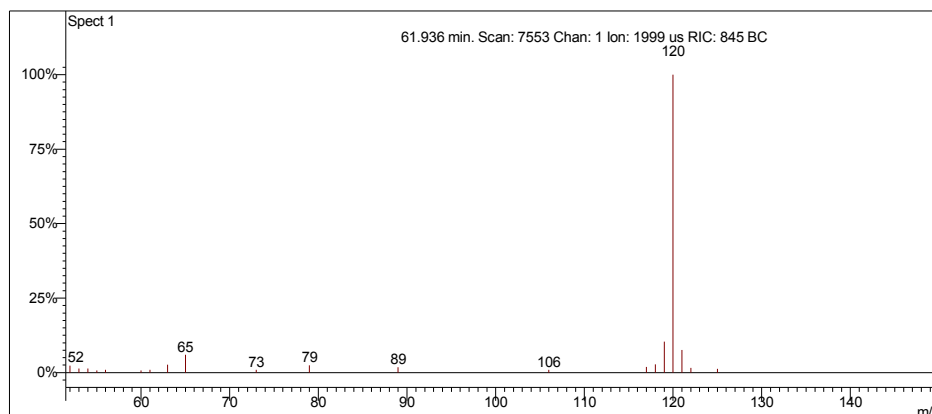
Scan 9711 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciact_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciact_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 9711, Time: 76.613 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 76.613 min. Scan: 9711 Chan: 1 Ion: 1674 us RIC: 8994
Pair Count: 54 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 7553 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 7553, Time: 61.936 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 61.936 min. Scan: 7553 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 845 BC
 Pair Count: 20 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
120	$[M]^{++} = C_9H_{12}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
105	$C_8H_{10}^+$	Perda de metila. Formação de íon tropílio substituído, caracterizando aromático alquil substituído com dois carbonos ou mais.
91	$[M - 15]^+ = C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.

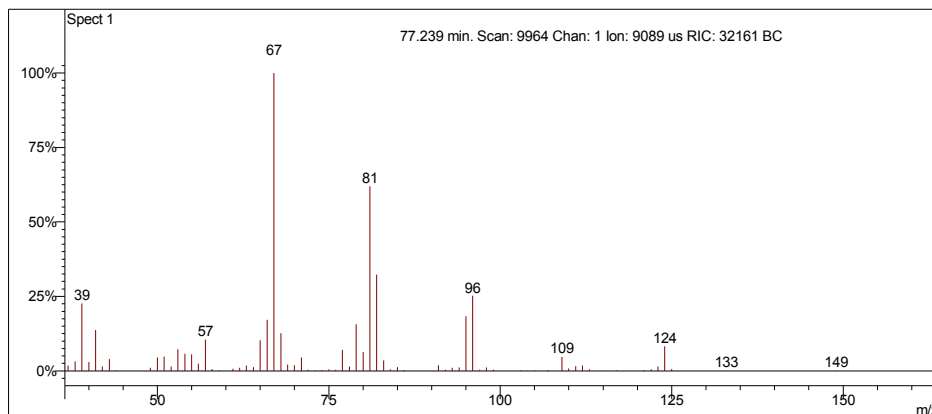
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 121$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\bullet} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \bullet\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_9\text{H}_{12} = \text{C}_9\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 120$	Transferência de carga.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\bullet} + \text{C}_9\text{H}_{12} = \text{C}_9\text{H}_{12}^{+\bullet} + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 38

Amostra de Gasolina Comum

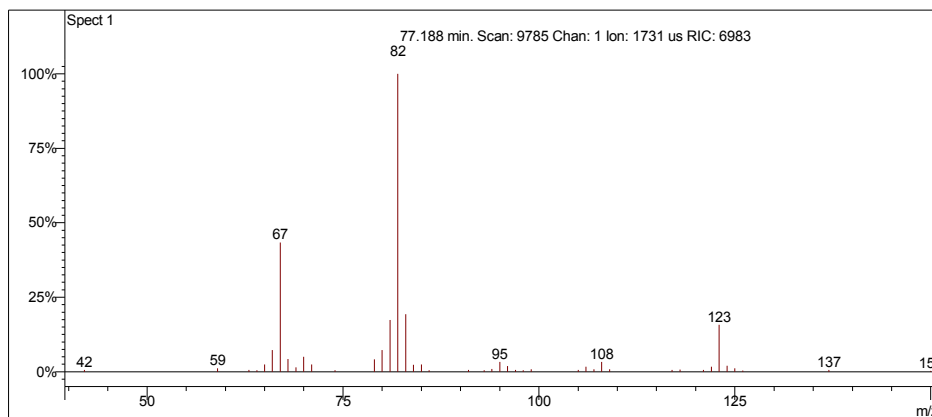
Scan 9964 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 9964, Time: 77.239 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 77.239 min. Scan: 9964 Chan: 1 Ion: 9089 us RIC: 32161 BC
Pair Count: 75 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

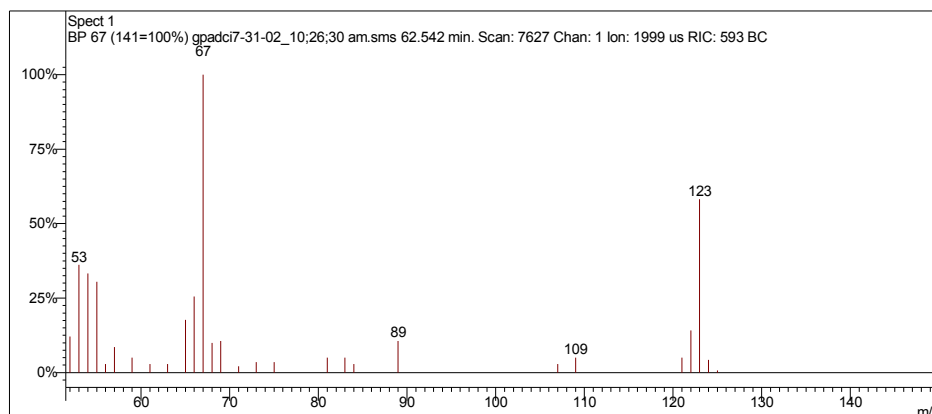
Scan 9785 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 9785, Time: 77.188 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 77.188 min. Scan: 9785 Chan: 1 Ion: 1731 us RIC: 6983
Pair Count: 43 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 7627 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 7627, Time: 62.542 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 62.542 min. Scan: 7627 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 593 BC
Pair Count: 28 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
124	$[M]^+ = C_9H_{16}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula cíclica ou com ressonância.
109	$[M - 15]^+ = C_8H_{13}^+$	Perda de metila.
95	$C_7H_{11}^+$	Perda de etila.
81	$C_6H_9^+$	Fragmentação do anel com rearranjos de hidrogênio.
67	$C_5H_7^+$	Fragmentação do anel.
55	$C_4H_7^+$	Fragmentação do anel.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação do anel.
Conclusão: a substância é um naftênico ramificado com 9 carbonos.		

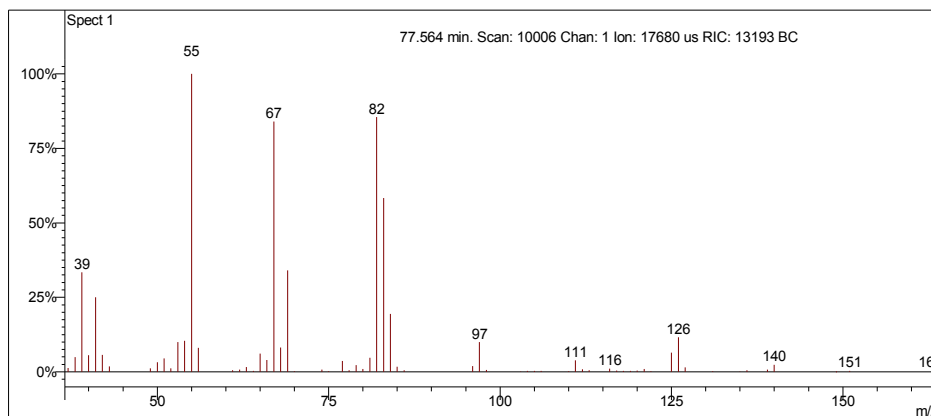
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^+ = 123$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\bullet} = \text{CH}_2\text{CN}^+ + \cdot\text{H}$ $\text{CH}_2\text{CN}^+ + \text{C}_9\text{H}_{16} = \text{C}_9\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M-1]^+ = 123$	Abstração de hidreto.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\bullet} = \text{CH}_2\text{OH}^+ + \cdot\text{H}$ $\text{CH}_2\text{OH}^+ + \text{C}_9\text{H}_{16} = \text{C}_9\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 39

Amostra de Gasolina Comum

Scan 10006 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms

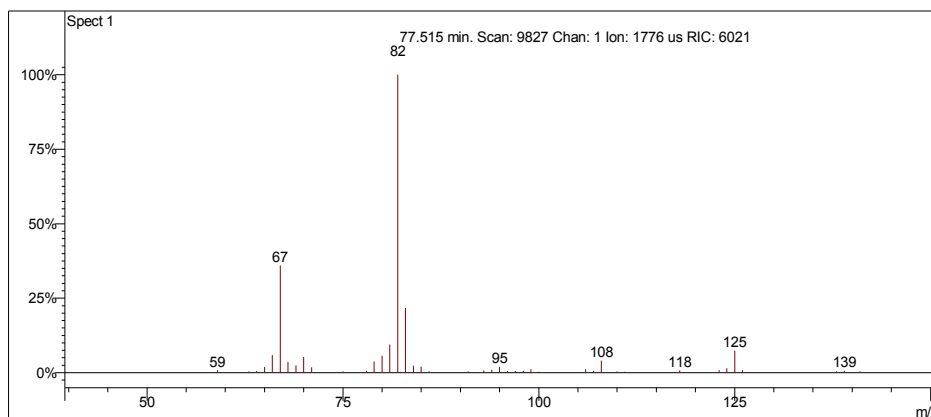


Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 10006, Time: 77.564 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 77.564 min. Scan: 10006 Chan: 1 Ion: 17680 us RIC: 13193 BC
Pair Count: 73 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

I

onização Química com Acetonitrila

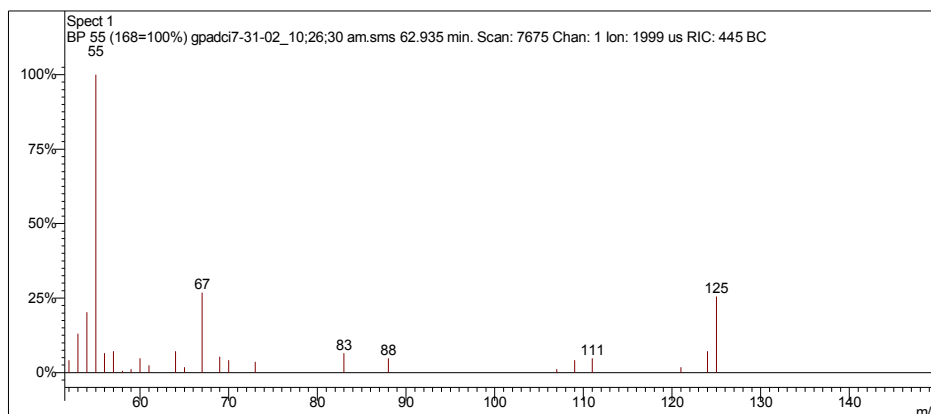
Scan 9827 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 9827, Time: 77.515 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 77.515 min. Scan: 9827 Chan: 1 Ion: 1776 us RIC: 6021
Pair Count: 42 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 7675 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 7675, Time: 62.935 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 62.935 min. Scan: 7675 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 445 BC
Pair Count: 24 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
126	$[M]^{+} = C_9H_{18}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
111	$[M - 15]^{+} = C_8H_{15}^{+}$	Perda de metila. Pico base.
97	$C_7H_{13}^{+}$	Perda de etila.
82	$C_6H_8^{+}$	Fragmentação do anel com rearranjos de hidrogênio.
67	$C_5H_7^{+}$	Fragmentação do anel.
55	$C_4H_7^{+}$	Fragmentação do anel.
41	$C_3H_5^{+}$	Fragmentação do anel.
Conclusão: substância é um naftênico ramificado com 9 carbonos.		

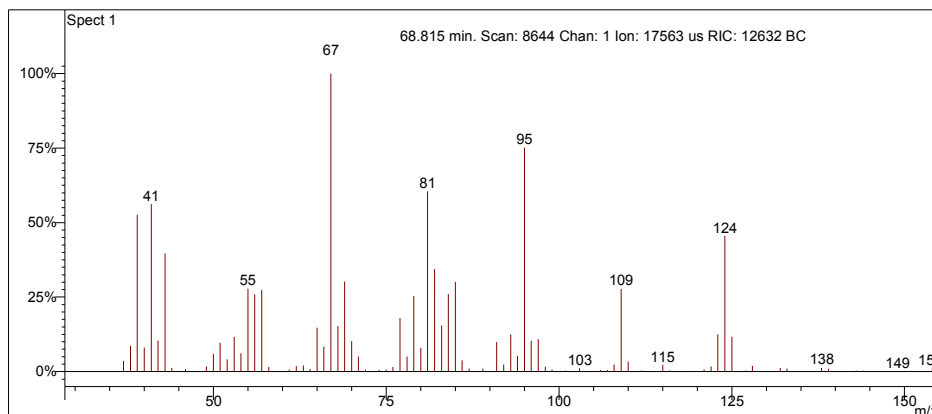
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^+ = 125$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\bullet} = \text{CH}_2\text{CN}^+ + \cdot\text{H}$ $\text{CH}_2\text{CN}^+ + \text{C}_9\text{H}_{18} = \text{C}_9\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M-1]^+ = 125$	Abstração de hidreto.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\bullet} = \text{CH}_2\text{OH}^+ + \cdot\text{H}$ $\text{CH}_2\text{OH}^+ + \text{C}_9\text{H}_{18} = \text{C}_9\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 40

Amostra de Gasolina Comum

Scan 8644 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 8644, Time: 68.815 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 68.815 min. Scan: 8644 Chan: 1 Ion: 17563 us RIC: 12632 BC
Pair Count: 113 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

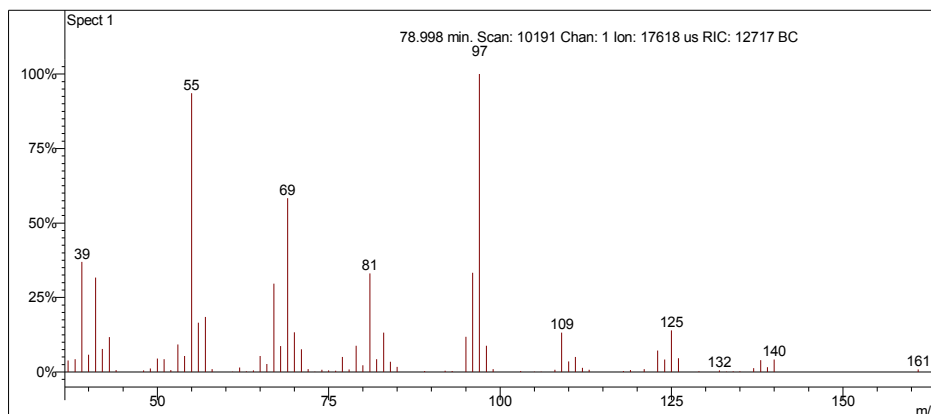
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
124	$[M]^{+} = C_9H_{16}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula cíclica ou com ressonância.
109	$[M - 15]^{+} = C_8H_{13}^{+}$	Perda de metila.
95	$[M - 29]^{+} = C_7H_{11}^{+}$	Perda de etila.
81	$C_6H_9^{+}$	Fragmentação do anel com rearranjos de hidrogênio.
67	$C_5H_7^{+}$	Fragmentação do anel com rearranjos de hidrogênio.
Conclusão: a substância é um olefínico com 9 carbonos.		

Desconhecido 41

Amostra de Gasolina Comum

Scan 10191 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
 Scan No: 10191, Time: 78.998 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 78.998 min. Scan: 10191 Chan: 1 Ion: 17618 us RIC: 12717 BC
 Pair Count: 87 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

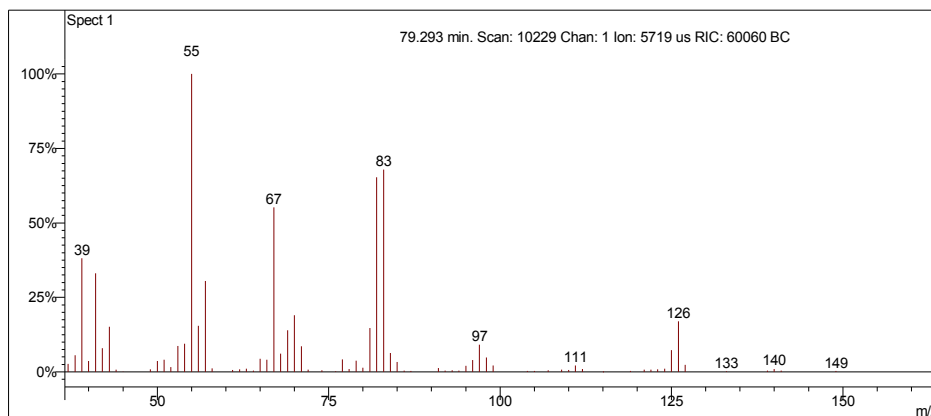
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
140	$[M]^+ = C_{10}H_{20}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
125	$[M - 15]^+ = C_9H_{18}^+$	Perda de metila.
109	$C_8H_{13}^+$	Perda de etano com rearranjo de hidrogênio.
97	$C_7H_{13}^+$	Perda de propila.
81	$C_6H_9^+$	Perda de propano com rearranjo de hidrogênio.
69	$C_5H_9^+$	Perda de butila.
55	$C_4H_7^+$	Fragmentação do anel.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação do anel.
Conclusão: substância é um naftênico ramificado com 10 carbonos.		

Isopropilcicloexano

Amostra de Gasolina Comum

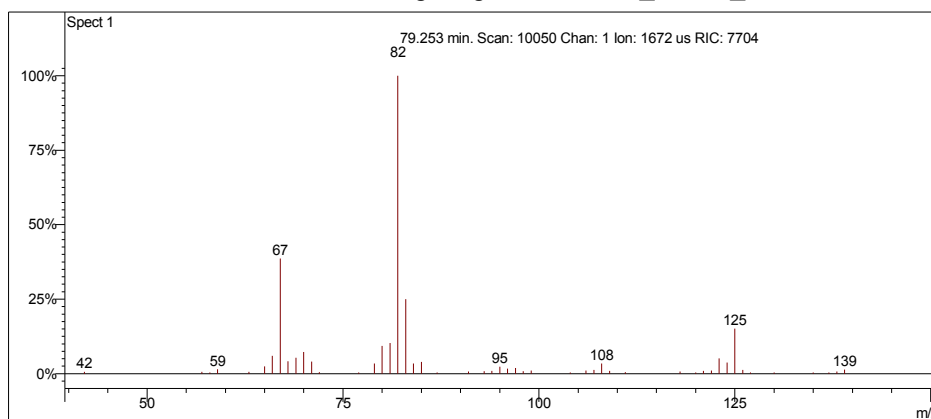
Scan 10229 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 10229, Time: 79.293 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 79.293 min. Scan: 10229 Chan: 1 Ion: 5719 us RIC: 60060 BC
Pair Count: 77 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

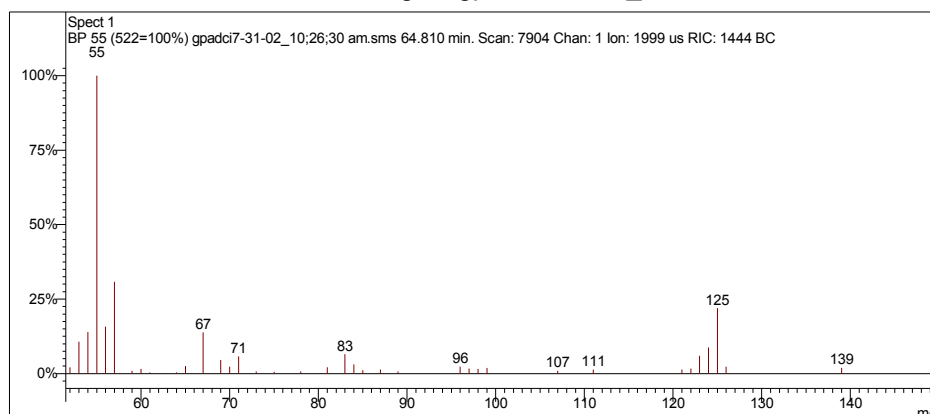
Scan 10050 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 10050, Time: 79.253 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 79.253 min. Scan: 10050 Chan: 1 Ion: 1672 us RIC: 7704
Pair Count: 51 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 7904 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 7904, Time: 64.810 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 64.810 min. Scan: 7904 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1444 BC
Pair Count: 38 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
126	$[M]^+ = C_9H_{18}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
111	$[M - 15]^+ = C_8H_{15}^+$	Perda de metila. Pico base.
97	$C_7H_{13}^+$	Perda de etila.
83	$C_6H_{11}^+$	Perda de propano com rearranjo de hidrogênio.
67	$C_5H_7^+$	Perda de butano com rearranjo de hidrogênio.
55	$C_4H_7^+$	Fragmentação do anel.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação do anel.

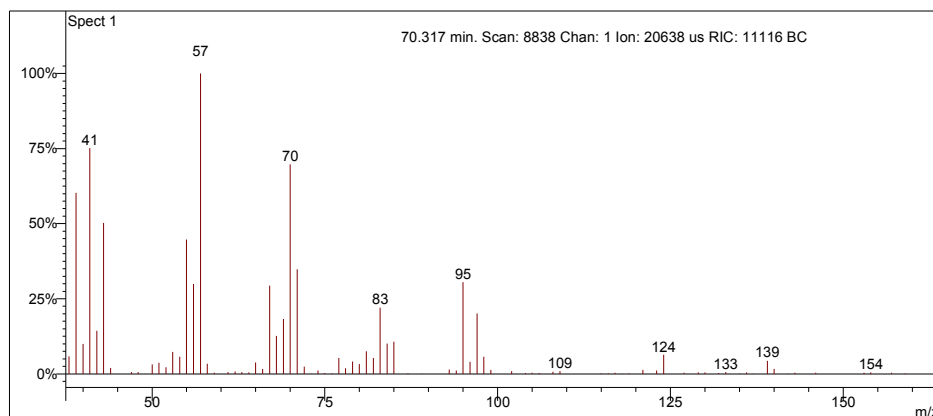
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M-1]^+ = 125$	Abstração de hidreto.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\bullet} = \text{CH}_2\text{CN}^+ + \cdot\text{H}$ $\text{CH}_2\text{CN}^+ + \text{C}_9\text{H}_{18} = \text{C}_9\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M-1]^+ = 125$	Abstração de hidreto.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\bullet} = \text{CH}_2\text{OH}^+ + \cdot\text{H}$ $\text{CH}_2\text{OH}^+ + \text{C}_9\text{H}_{18} = \text{C}_9\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 42

Amostra de Gasolina Comum

Scan 8838 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 8838, Time: 70.317 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 70.317 min. Scan: 8838 Chan: 1 Ion: 20638 us RIC: 11116 BC
Pair Count: 110 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

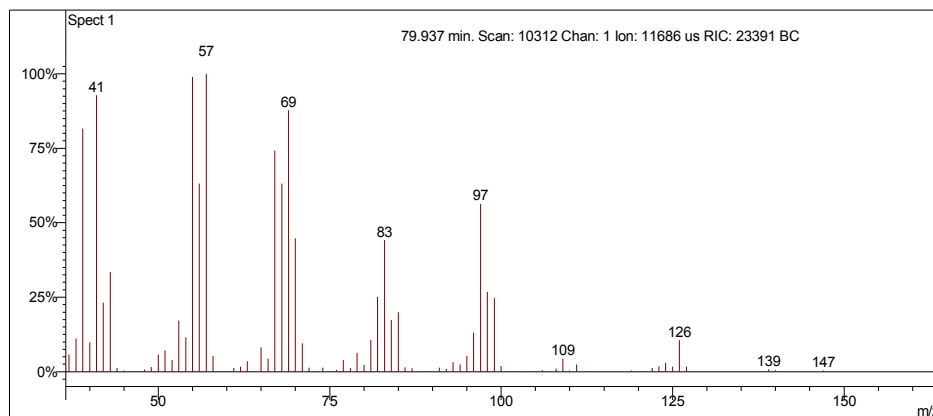
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
140	$[M]^+ = C_{10}H_{20}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
124	$[M - 16]^+ = C_9H_{16}^+$	Perda de metano com rearranjo de hidrogênio.
83	$C_6H_{11}^+$	Perda de butila.
70	$C_5H_{10}^+$	Perda de pentano.
57	$C_4H_9^+$	Fragmentação alílica.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação alílica.
Conclusão: substância é um isoparafínico com 10 carbonos.		

2,2-dimetiloctano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 10312 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 10312, Time: 79.937 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 79.937 min. Scan: 10312 Chan: 1 Ion: 11686 us RIC: 23391 BC
Pair Count: 75 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

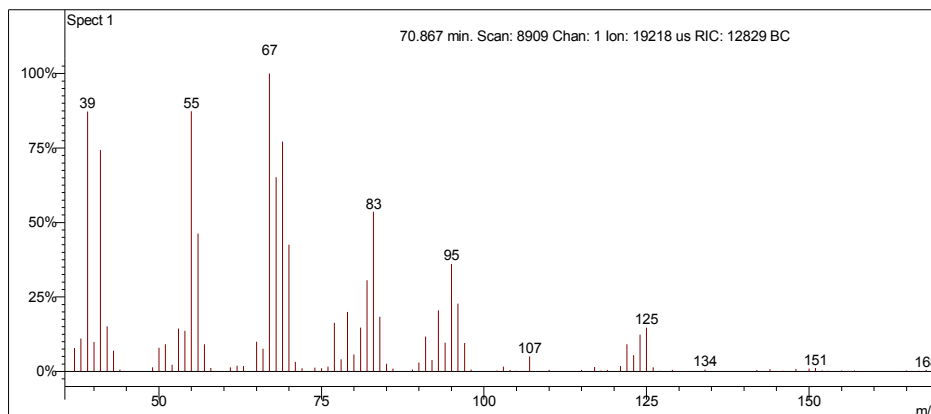
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
142	$[M]^{++} = C_{10}H_{22}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
126	$[M - 15]^+ = C_9H_{19}^+$	Perda de metila.
97	$C_7H_{13}^+$	Perda de propano com rearranjo de hidrogênio.
83	$C_6H_{11}^+$	Perda de butano com rearranjo de hidrogênio.
69	$C_5H_9^+$	Perda de pentano com rearranjo de hidrogênio.
57	$C_4H_9^+$	Fragmentação alílica.

Desconhecido 43

Amostra de Gasolina Comum

Scan 8909 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 8909, Time: 70.867 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 70.867 min. Scan: 8909 Chan: 1 Ion: 19218 us RIC: 12829 BC
Pair Count: 113 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

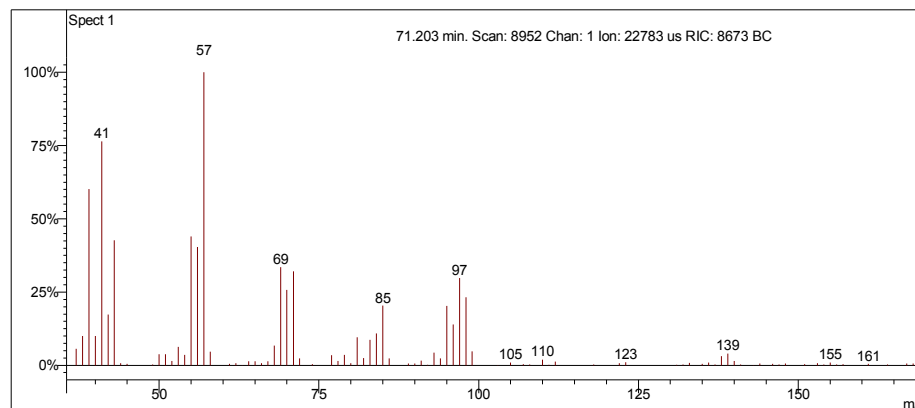
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
140 (ausente)	$[M]^+ = C_{10}H_{20}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
125	$[M - 15]^+ = C_9H_{18}^+$	Perda de metila.
107	$C_8H_{11}^+$	Perda de etano com rearranjos de hidrogênio.
95	$C_7H_{11}^+$	Perda de propano com rearranjo de hidrogênio.
83	$C_6H_{11}^+$	Fragmentação do anel com perda de butila.
67	$C_5H_7^+$	Perda de pentano com rearranjo de hidrogênio.
55	$C_4H_7^+$	Fragmentação do anel.
Conclusão: substância é um naftênico ramificado com 10 carbonos.		

Desconhecido 44

Amostra de Gasolina Comum

Scan 8952 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 8952, Time: 71.203 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 71.203 min. Scan: 8952 Chan: 1 Ion: 22783 us RIC: 8673 BC
Pair Count: 113 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

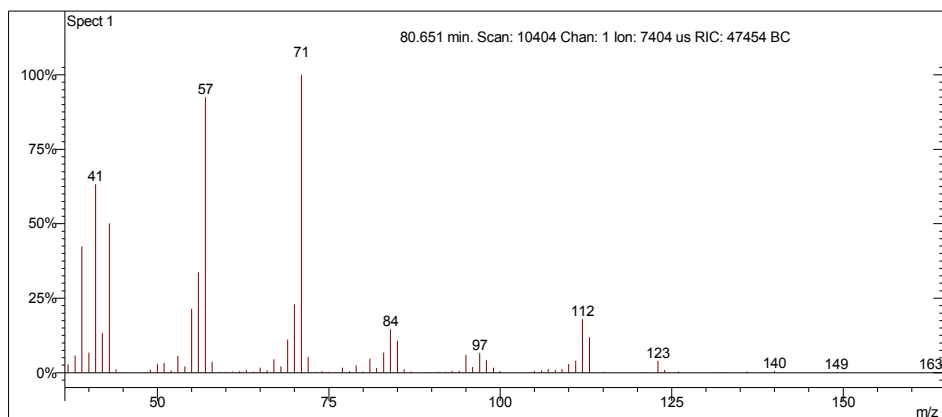
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
140	$[M]^{++} = C_{10}H_{20}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
97	$C_7H_{13}^+$	Perda de propano com rearranjo de hidrogênio.
85	$C_6H_{13}^+$	Perda de butila.
69	$C_5H_9^+$	Perda de pentila.
57	$C_4H_9^+$	Fragmentação do anel.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação do anel.
Conclusão: substância é um isoparafínico com 10 carbonos.		

2,6-dimetiloctano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 10404 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 10404, Time: 80.651 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 80.651 min. Scan: 10404 Chan: 1 Ion: 7404 us RIC: 47454 BC
Pair Count: 86 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

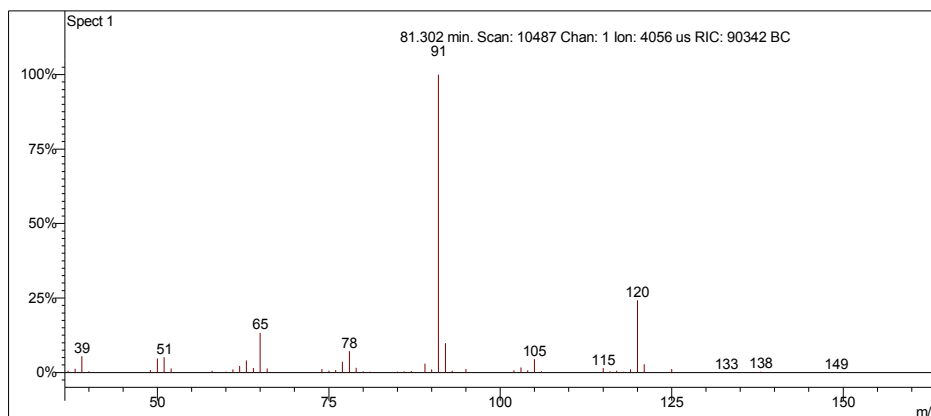
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
142 (ausente)	$[M]^{++} = C_{10}H_{22}^{+}$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
112	$[M - 30]^{+} = C_9H_{19}^{+}$	Perda de etano.
97	$C_7H_{13}^{+}$	Perda de propano com rearranjo de hidrogênio.
84	$C_6H_{12}^{+}$	Perda de butano.
71	$C_5H_{11}^{+}$	Perda de pentila.
57	$C_4H_9^{+}$	Fragmentação alílica.

Propilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

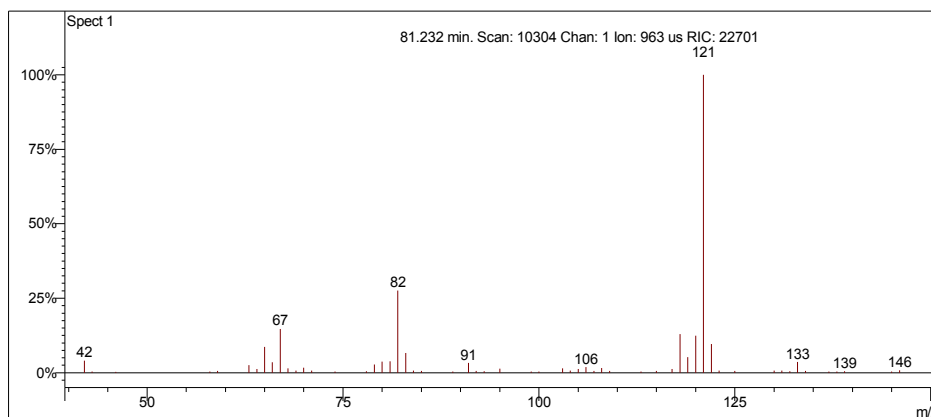
Scan 10487 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 10487, Time: 81.302 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 81.302 min. Scan: 10487 Chan: 1 Ion: 4056 us RIC: 90342 BC
Pair Count: 69 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

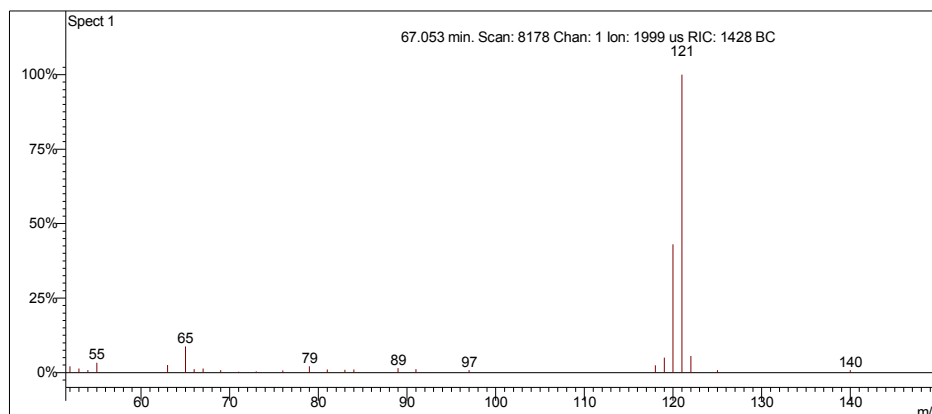
Scan 10304 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 10304, Time: 81.232 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 81.232 min. Scan: 10304 Chan: 1 Ion: 963 us RIC: 22701
Pair Count: 60 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 8178 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 8178, Time: 67.053 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 67.053 min. Scan: 8178 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1428 BC
Pair Count: 26 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
120	$[M]^{+} = C_9H_{12}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Perda de metila. Formação de íon tropílio substituído, caracterizando aromático alquil substituído com dois carbonos ou mais.
92	$C_7H_8^{+}$	Rearranjo de hidrogênio. Para que este rearranjo ocorra, a substituição alquílica deve ser longa e o aromático deve ser mono substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.

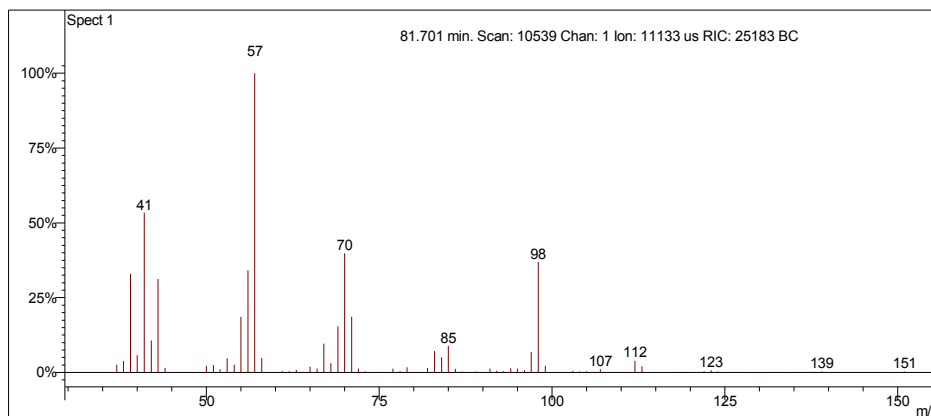
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 121$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\bullet} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_9\text{H}_{12} = \text{C}_9\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 121$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\bullet} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_9\text{H}_{12} = \text{C}_9\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 45

Amostra de Gasolina Comum

Scan 10539 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
 Scan No: 10539, Time: 81.701 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 81.701 min. Scan: 10539 Chan: 1 Ion: 11133 us RIC: 25183 BC
 Pair Count: 84 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

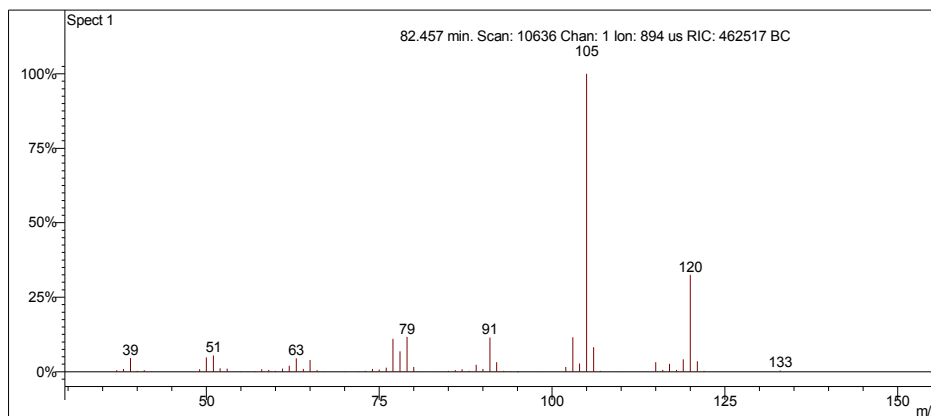
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
140	$[M]^+ = C_{10}H_{20}^+$	Íon molecular ausente indica molécula linear ou muito ramificada.
125	$[M - 15]^+ = C_9H_{18}^+$	Perda de metila.
112	$C_8H_{15}^+$	Perda de etila.
98	$C_7H_{14}^+$	Fragmentação do anel.
85	$C_6H_{13}^+$	Fragmentação do anel.
70	$C_5H_{10}^+$	Fragmentação do anel.
57	$C_4H_9^+$	Fragmentação do anel.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação do anel.
Conclusão: substância é um naftênico ramificado com 10 carbonos.		

1-etil-3-metilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

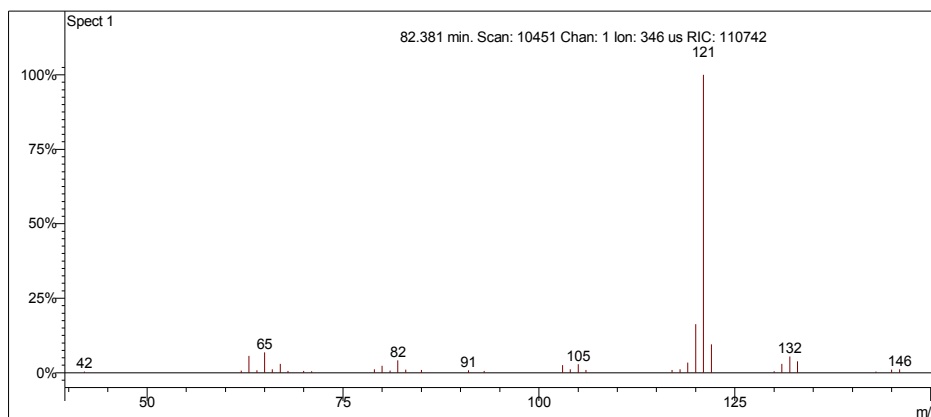
Scan 10636 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 10636, Time: 82.457 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 82.457 min. Scan: 10636 Chan: 1 Ion: 894 us RIC: 462517 BC
Pair Count: 64 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

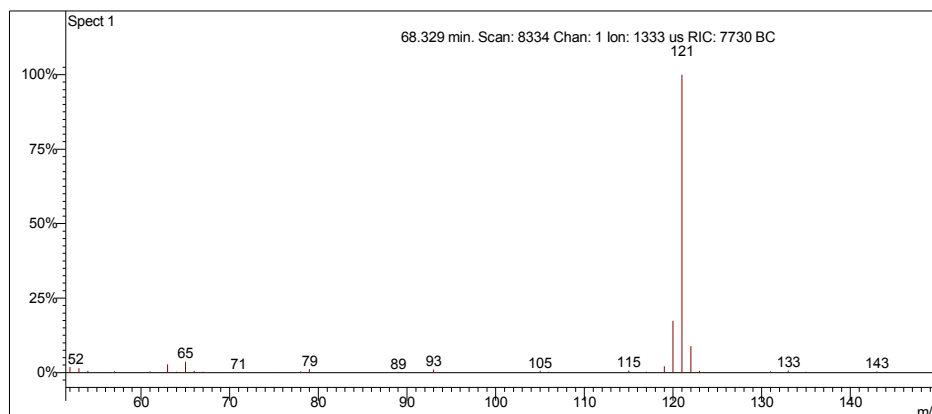
Scan 10451 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 10451, Time: 82.381 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 82.381 min. Scan: 10451 Chan: 1 Ion: 346 us RIC: 110742
Pair Count: 37 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 8334 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 8334, Time: 68.329 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 68.329 min. Scan: 8334 Chan: 1 Ion: 1333 us RIC: 7730 BC
Pair Count: 34 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
120	$[M]^{+} = C_9H_{12}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Perda de metila. Formação de íon tropílio substituído, caracterizando aromático alquil substituído com dois carbonos ou mais.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.

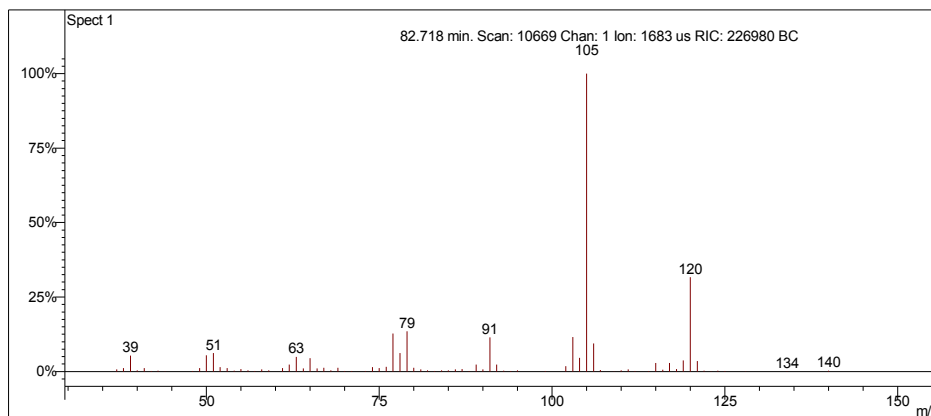
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 121$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^+ + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_9\text{H}_{12} = \text{C}_9\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 121$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^+ + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_9\text{H}_{12} = \text{C}_9\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

1-etil-4-metilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

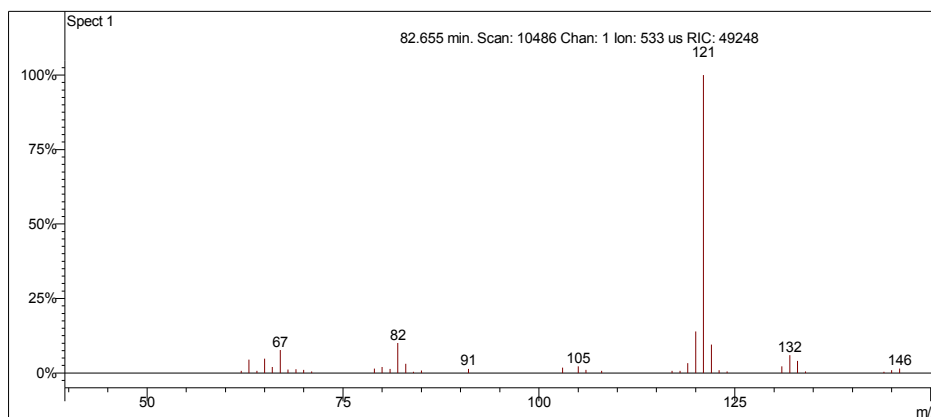
Scan 10669 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 10669, Time: 82.718 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 82.718 min. Scan: 10669 Chan: 1 Ion: 1683 us RIC: 226980 BC
Pair Count: 81 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

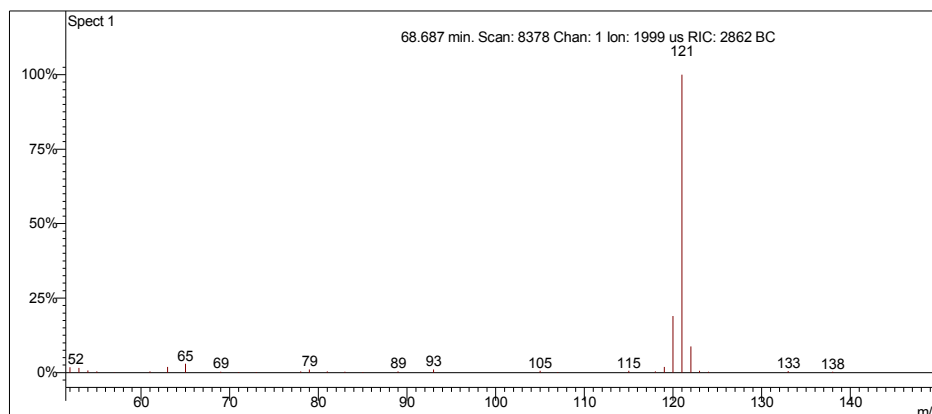
Scan 10486 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 10486, Time: 82.655 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 82.655 min. Scan: 10486 Chan: 1 Ion: 533 us RIC: 49248
Pair Count: 37 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 8378 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 8378, Time: 68.687 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 68.687 min. Scan: 8378 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 2862 BC
Pair Count: 30 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

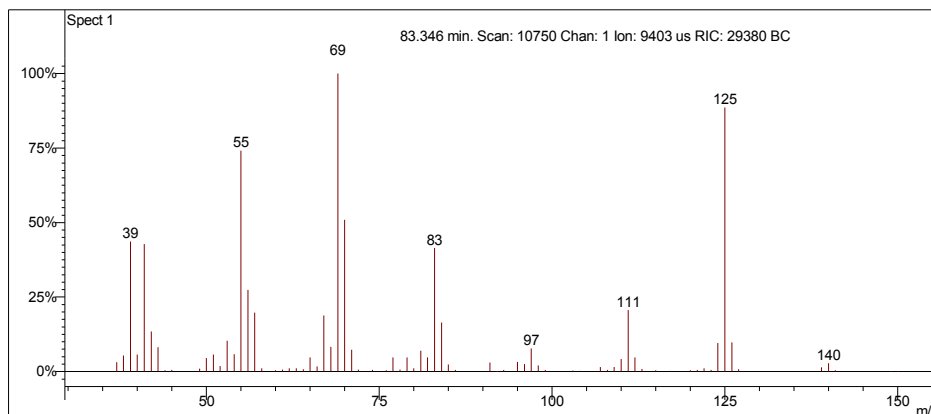
Íon m/z	Fragmento	Observação
120	$[M]^{++} = C_9H_{12}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
105	$C_8H_{10}^+$	Perda de metila. Formação de íon tropílio substituído, caracterizando aromático alquil substituído com dois carbonos ou mais.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.

Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 121$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\bullet} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \bullet\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_9\text{H}_{12} = \text{C}_9\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 121$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\bullet} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \bullet\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_9\text{H}_{12} = \text{C}_9\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 46

Scan 10750 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 10750, Time: 83.346 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 83.346 min. Scan: 10750 Chan: 1 Ion: 9403 us RIC: 29380 BC
Pair Count: 84 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

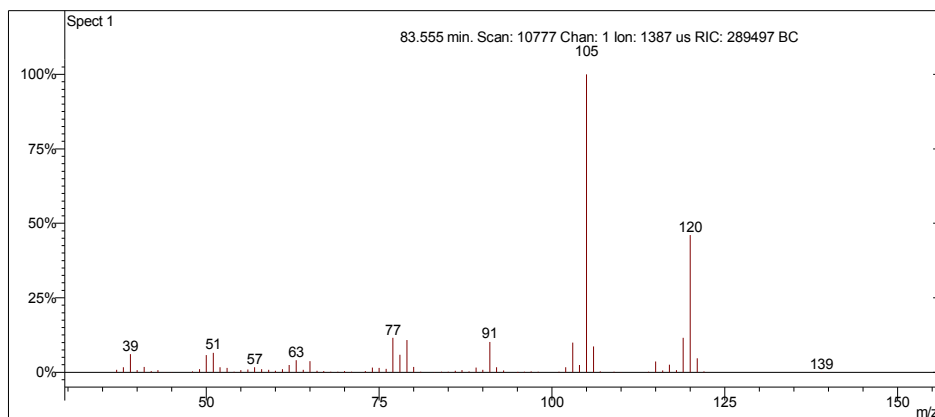
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
140	$[M]^{+} = C_{10}H_{20}^{+}$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
125	$[M - 15]^{+} = C_9H_{18}^{+}$	Perda de metila.
111	$[M - 29]^{+} = C_8H_{15}^{+}$	Perda de etila.
97	$C_7H_{13}^{+}$	Perda de propila.
83	$C_6H_{11}^{+}$	Perda de butila.
69	$C_5H_9^{+}$	Perda de pentila.
55	$C_4H_7^{+}$	Fragmentação do anel.
41	$C_3H_5^{+}$	Fragmentação do anel.
Conclusão: substância é um naftênico ramificado com 10 carbonos.		

1,3,5-trimetilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

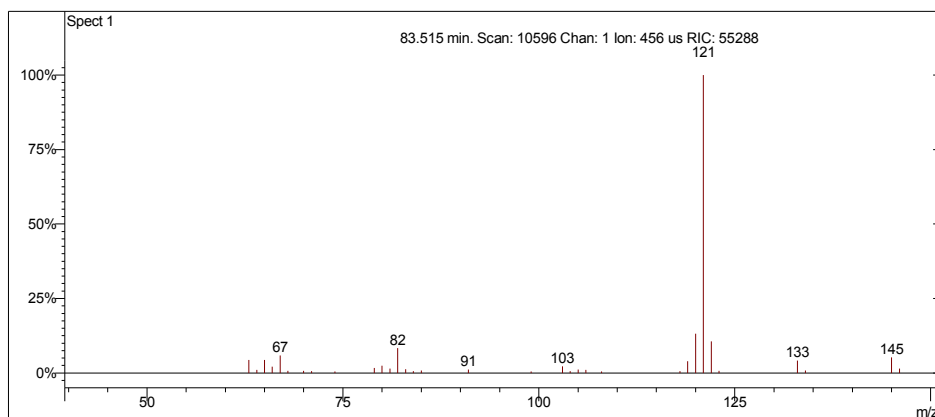
Scan 10777 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 10777, Time: 83.555 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 83.555 min. Scan: 10777 Chan: 1 Ion: 1387 us RIC: 289497 BC
Pair Count: 77 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

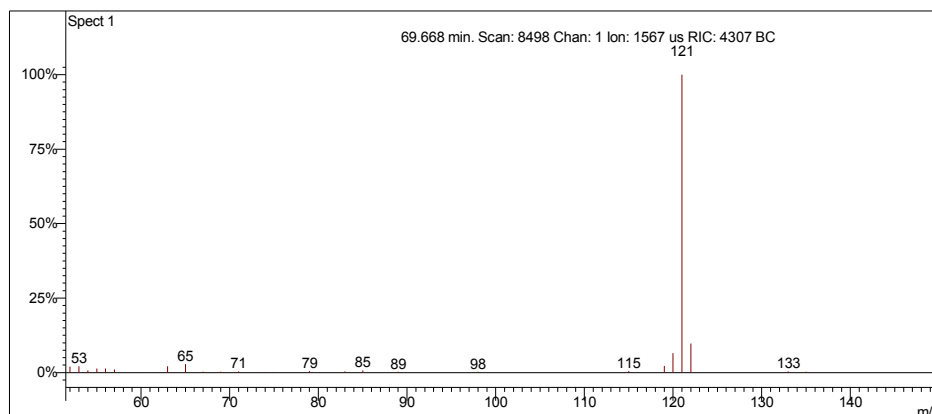
Scan 10596 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 10596, Time: 83.515 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 83.515 min. Scan: 10596 Chan: 1 Ion: 456 us RIC: 55288
Pair Count: 34 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 8498 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 8498, Time: 69.668 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 69.668 min. Scan: 8498 Chan: 1 Ion: 1567 us RIC: 4307 BC
 Pair Count: 28 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
120	$[M]^+ = C_9H_{12}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
105	$C_8H_{10}^+$	Perda de metila. Formação de íon tropílio substituído, caracterizando aromático alquil substituído com dois carbonos ou mais.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.

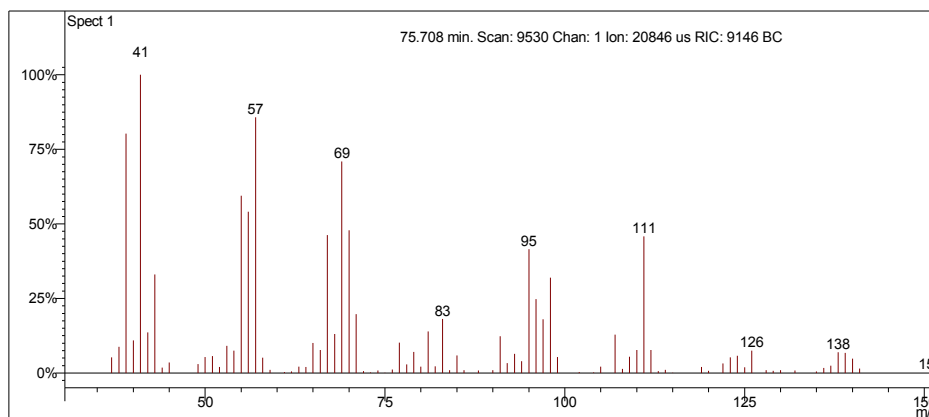
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 121$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^+ + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_9\text{H}_{12} = \text{C}_9\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 121$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^+ + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_9\text{H}_{12} = \text{C}_9\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 47

Amostra de Gasolina Comum

Scan 9530 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
 Scan No: 9530, Time: 75.708 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 75.708 min. Scan: 9530 Chan: 1 Ion: 20846 us RIC: 9146 BC
 Pair Count: 107 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

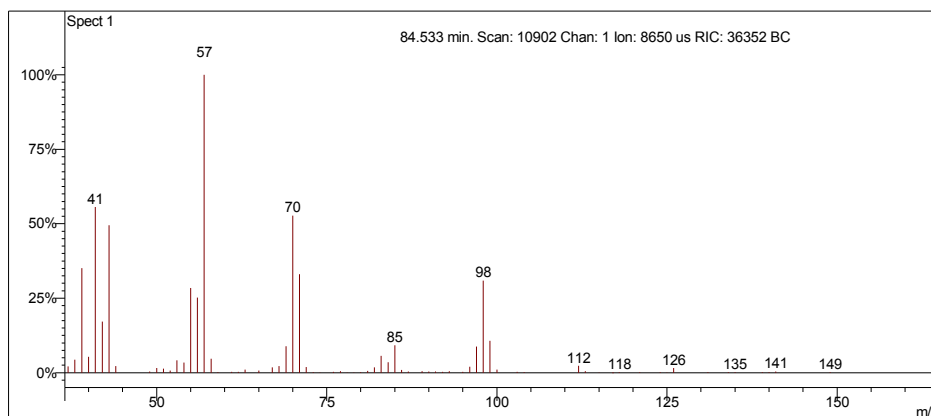
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
140	$[M]^{++} = C_{10}H_{20}^{+}$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
111	$[M - 29]^{+} = C_8H_{15}^{+}$	Perda de etila.
95	$C_7H_{11}^{+}$	Perda de propano com rearranjo de hidrogênio.
83	$C_6H_{11}^{+}$	Perda de butila.
69	$C_5H_9^{+}$	Perda de pentila.
57	$C_4H_9^{+}$	Fragmentação alílica.
41	$C_3H_5^{+}$	Fragmentação alílica.
Conclusão: substância é um isoparafínico com 10 carbonos.		

5-metilnonano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 10902 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 10902, Time: 84.533 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 84.533 min. Scan: 10902 Chan: 1 Ion: 8650 us RIC: 36352 BC
Pair Count: 81 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

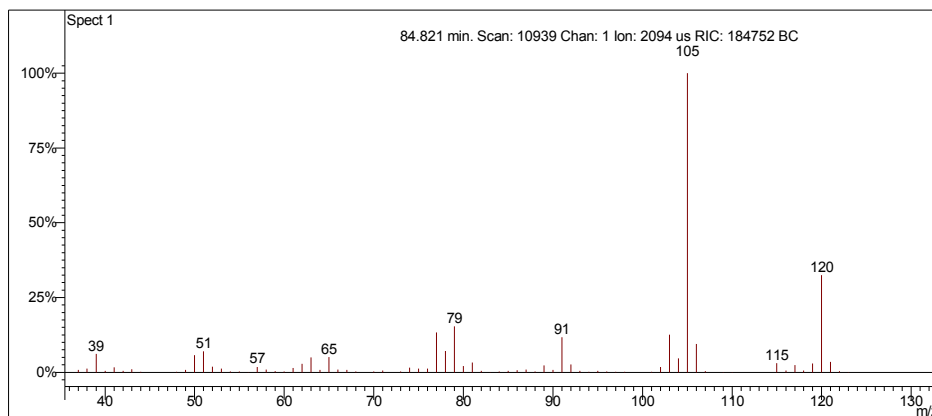
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
142 (ausente)	$[M]^{++} = C_{10}H_{22}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
126	$[M - 15]^+ = C_9H_{19}^+$	Perda de metila.
112	$C_8H_{16}^+$	Perda de etano.
98	$C_7H_{14}^+$	Perda de propano.
85	$C_6H_{13}^+$	Perda de propila.
70	$C_5H_{10}^+$	Perda de pentano.
57	$C_4H_9^+$	Fragmentação alílica.

2-etil-1-metilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

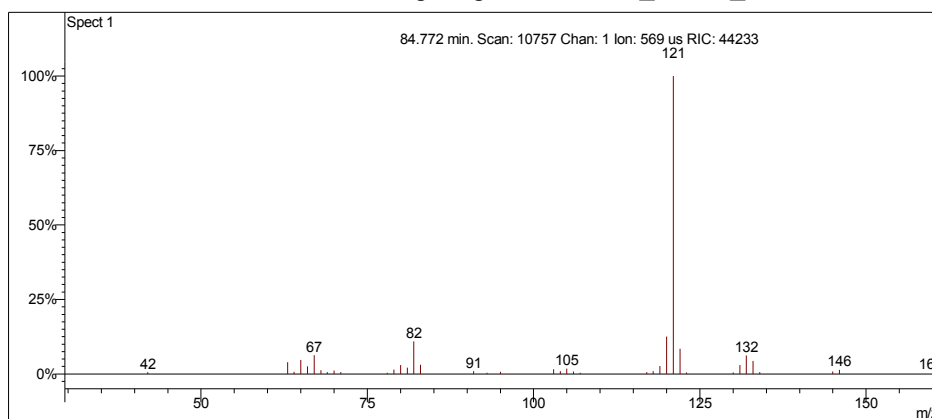
Scan 10939 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 10939, Time: 84.821 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 84.821 min. Scan: 10939 Chan: 1 Ion: 2094 us RIC: 184752 BC
Pair Count: 79 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

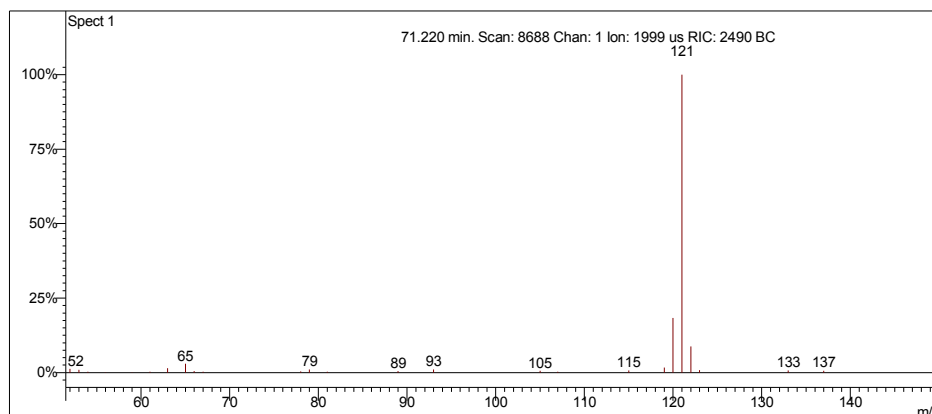
Scan 10757 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 10757, Time: 84.772 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 84.772 min. Scan: 10757 Chan: 1 Ion: 569 us RIC: 44233
Pair Count: 39 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 8688 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 8688, Time: 71.220 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 71.220 min. Scan: 8688 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 2490 BC
 Pair Count: 25 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
120	$[M]^{+} = C_9H_{12}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Perda de metila. Formação de íon tropílio substituído, caracterizando aromático alquil substituído com dois carbonos ou mais.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.

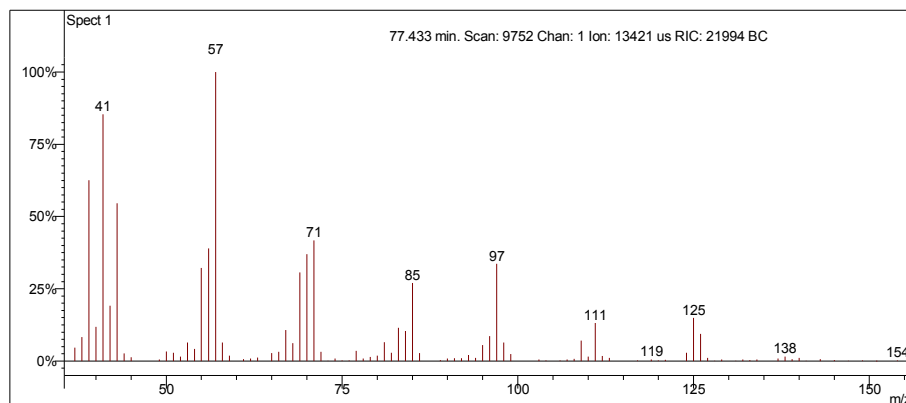
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 121$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_9\text{H}_{12} = \text{C}_9\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 121$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_9\text{H}_{12} = \text{C}_9\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

2-metilnonano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 9752 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 9752, Time: 77.433 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 77.433 min. Scan: 9752 Chan: 1 Ion: 13421 us RIC: 21994 BC
Pair Count: 107 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

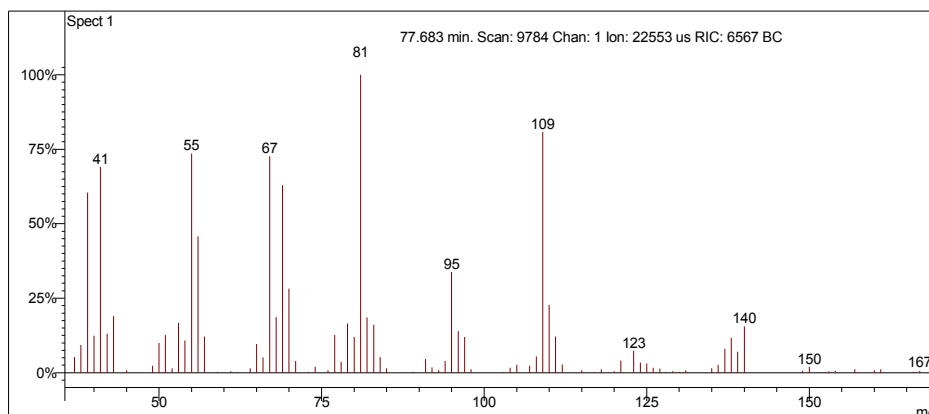
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
142 (ausente)	$[M]^+ = C_{10}H_{22}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
126	$[M - 15]^+ = C_9H_{19}^+$	Perda de metila.
111	$C_8H_{15}^+$	Perda de etano com rearranjo de hidrogênio.
97	$C_7H_{13}^+$	Perda de propano com rearranjo de hidrogênio.
85	$C_6H_{13}^+$	Perda de butila.
71	$C_5H_{11}^+$	Perda de pentila.
57	$C_4H_9^+$	Fragmentação alílica.

Desconhecido 48

Amostra de Gasolina Comum

Scan 9784 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
 Scan No: 9784, Time: 77.683 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 77.683 min. Scan: 9784 Chan: 1 Ion: 22553 us RIC: 6567 BC
 Pair Count: 109 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

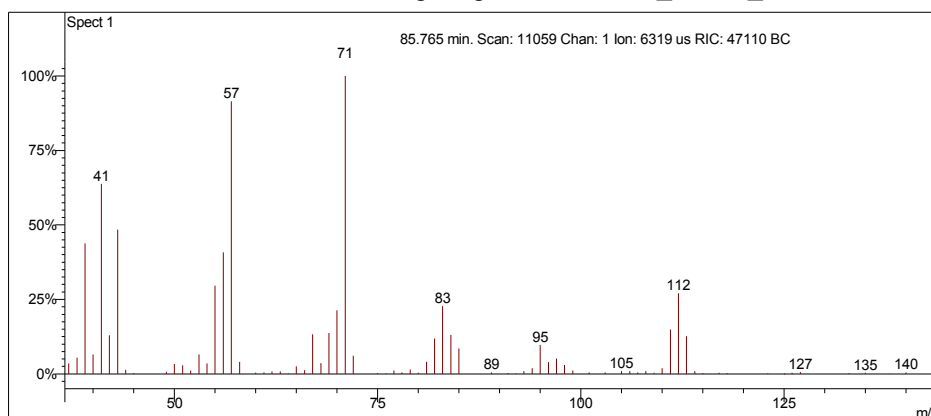
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
140	$[M]^+ = C_{10}H_{20}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
125	$[M - 15]^+ = C_9H_{18}^+$	Perda de metila.
109	$C_8H_{13}^+$	Perda de etano com rearranjo.
95	$C_7H_{11}^+$	Perda de propano com rearranjo.
81	$C_6H_9^+$	Perda de butano com rearranjo.
67	$C_5H_7^+$	Perda de pentano com rearranjo.
55	$C_4H_7^+$	Fragmentação do anel.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação do anel.
Conclusão: substância é um naftênico ramificado com 10 carbonos.		

3-metilnonano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 11059 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 11059, Time: 85.765 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 85.765 min. Scan: 11059 Chan: 1 Ion: 6319 us RIC: 47110 BC
Pair Count: 82 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

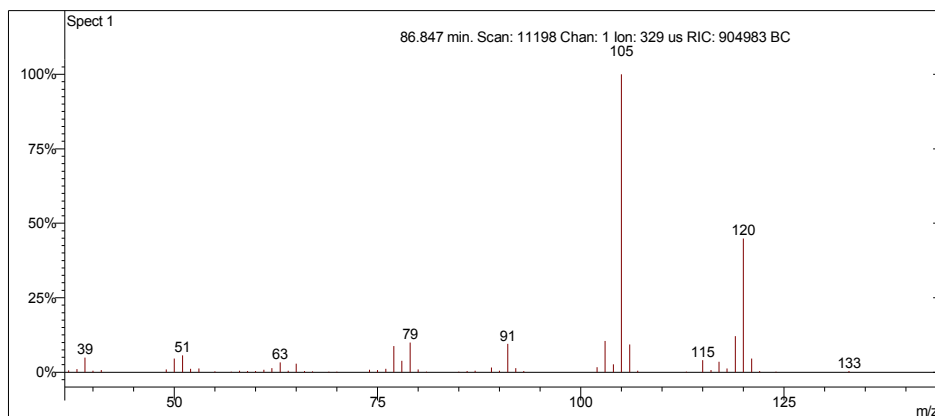
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
142 (ausente)	$[M]^{++} = C_{10}H_{22}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
127	$[M - 15]^+ = C_9H_{19}^+$	Perda de metila.
112	$C_8H_{16}^+$	Perda de etano.
83	$C_6H_{11}^+$	Perda de butano com rearranjo de hidrogênio.
71	$C_5H_{11}^+$	Perda de pentila.
57	$C_4H_9^+$	Fragmentação alílica.

1,2,4-trimetilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

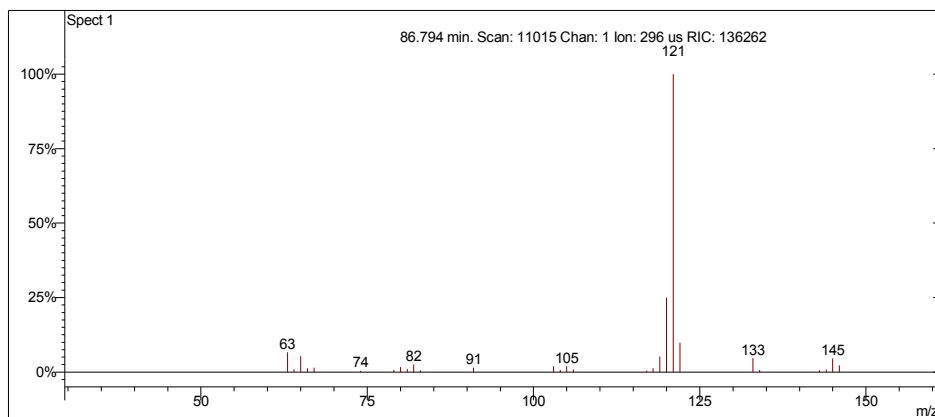
Scan 11198 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 11198, Time: 86.847 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 86.847 min. Scan: 11198 Chan: 1 Ion: 329 us RIC: 904983 BC
Pair Count: 58 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

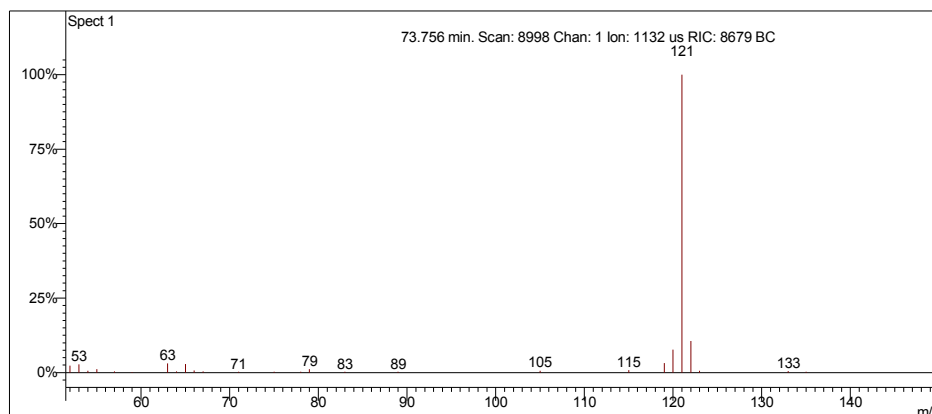
Scan 11015 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 11015, Time: 86.794 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 86.794 min. Scan: 11015 Chan: 1 Ion: 296 us RIC: 136262
Pair Count: 29 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 8998 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 8998, Time: 73.756 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 73.756 min. Scan: 8998 Chan: 1 Ion: 1132 us RIC: 8679 BC
 Pair Count: 26 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
120	$[M]^+ = C_9H_{12}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
105	$C_8H_{10}^+$	Perda de metila. Formação de íon tropílio substituído, caracterizando aromático alquil substituído com dois carbonos ou mais.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.

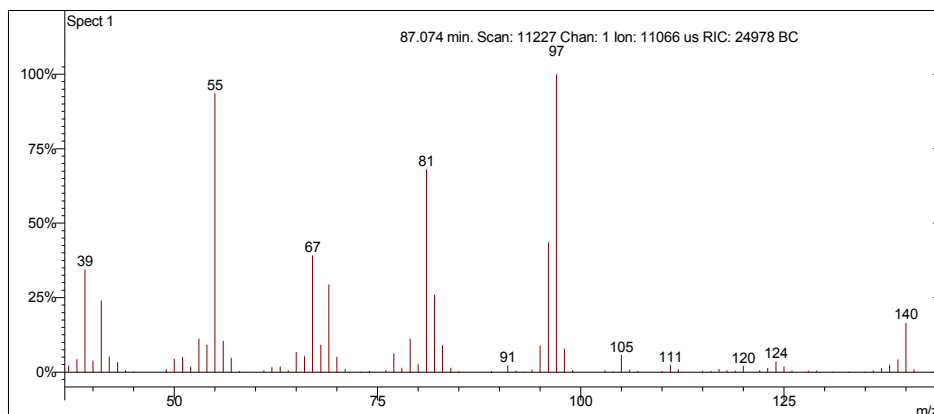
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 121$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\bullet} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_9\text{H}_{12} = \text{C}_9\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 121$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\bullet} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_9\text{H}_{12} = \text{C}_9\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Isobutilcicloexano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 11227 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 11227, Time: 87.074 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 87.074 min. Scan: 11227 Chan: 1 Ion: 11066 us RIC: 24978 BC
Pair Count: 98 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

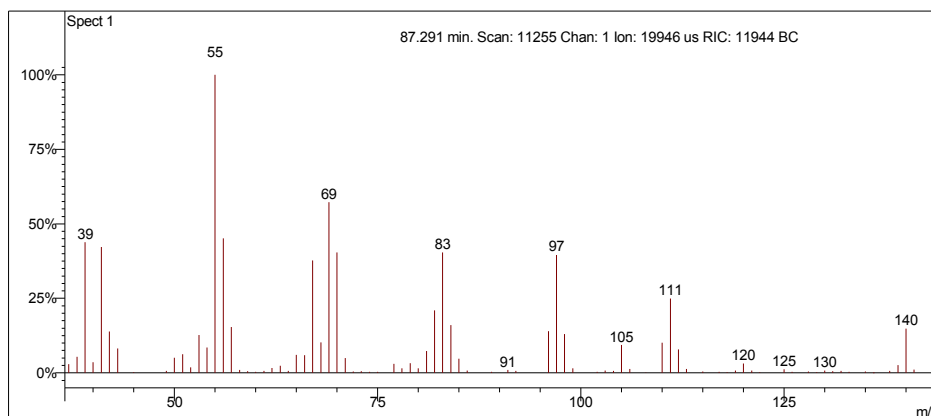
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
140	$[M]^+ = C_{10}H_{20}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula cíclica ou com ressonância.
97	$C_7H_{13}^+$	Perda de propila.
81	$C_6H_9^+$	Fragmentação do anel.
67	$C_5H_7^+$	Fragmentação do anel.
55	$C_4H_7^+$	Fragmentação do anel.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação do anel.

Desconhecido 49

Amostra de Gasolina Comum

Scan 11255 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 11255, Time: 87.291 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 87.291 min. Scan: 11255 Chan: 1 Ion: 19946 us RIC: 11944 BC
Pair Count: 95 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

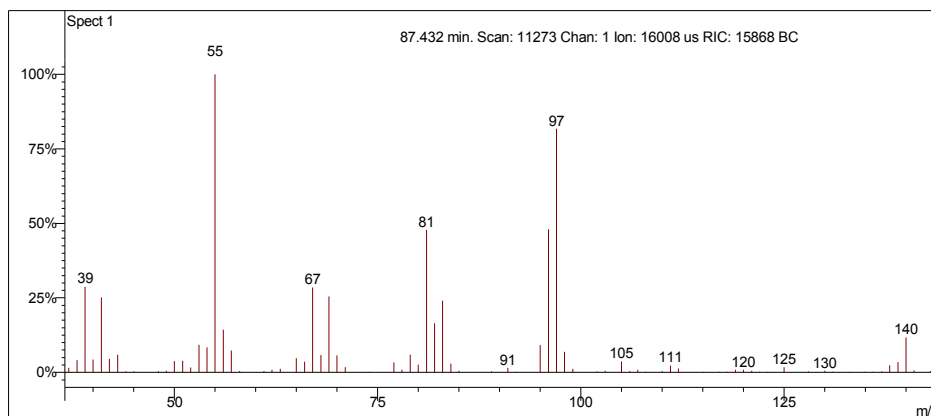
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
140	$[M]^{+} = C_{10}H_{20}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
125	$[M - 15]^{+} = C_9H_{18}^{+}$	Perda de metila.
111	$C_8H_{15}^{+}$	Perda de etila.
97	$C_7H_{13}^{+}$	Perda de propila.
83	$C_6H_{11}^{+}$	Perda de butila.
69	$C_5H_9^{+}$	Perda de pentila.
55	$C_4H_7^{+}$	Fragmentação do anel.
41	$C_3H_5^{+}$	Fragmentação do anel.
Conclusão: substância é um naftênico ramificado com 10 carbonos.		

Desconhecido 50

Amostra de Gasolina Comum

Scan 11273 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 11273, Time: 87.432 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 87.432 min. Scan: 11273 Chan: 1 Ion: 16008 us RIC: 15868 BC
Pair Count: 97 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

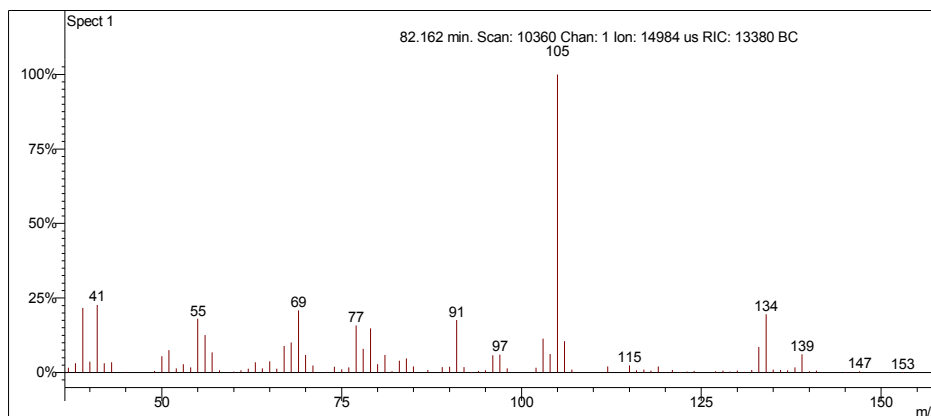
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
140	$[M]^{+} = C_{10}H_{20}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
125	$[M - 15]^{+} = C_9H_{18}^{+}$	Perda de metila.
111	$C_8H_{15}^{+}$	Perda de etila.
97	$C_7H_{13}^{+}$	Perda de propila.
81	$C_6H_9^{+}$	Fragmentação do anel.
67	$C_5H_7^{+}$	Fragmentação do anel.
55	$C_4H_7^{+}$	Fragmentação do anel.
41	$C_3H_5^{+}$	Fragmentação do anel.
Conclusão: substância é um naftênico ramificado com 10 carbonos.		

Sec-butilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

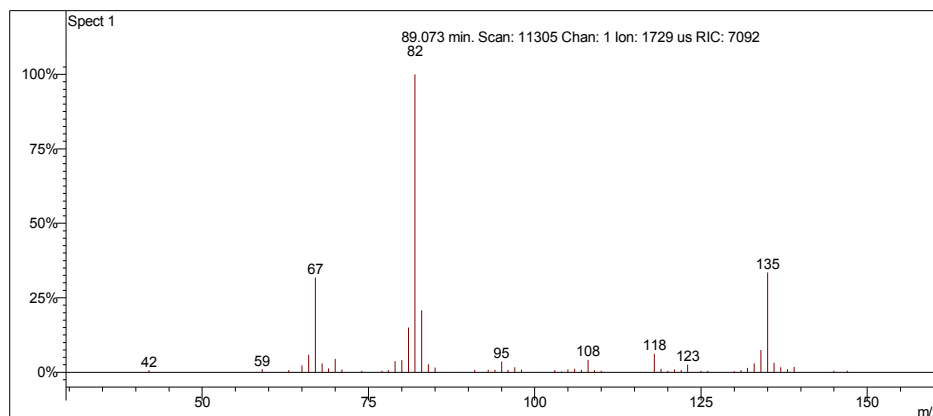
Scan 10360 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 10360, Time: 82.162 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 82.162 min. Scan: 10360 Chan: 1 Ion: 14984 us RIC: 13380 BC
Pair Count: 107 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

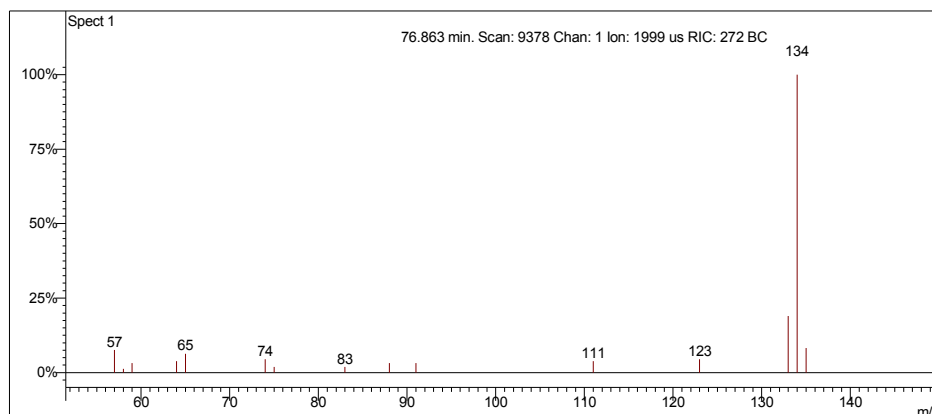
Scan 11305 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 11305, Time: 89.073 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 89.073 min. Scan: 11305 Chan: 1 Ion: 1729 us RIC: 7092
Pair Count: 55 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 9378 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 9378, Time: 76.863 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 76.863 min. Scan: 9378 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 272 BC
 Pair Count: 15 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
134	$[M]^{++} = C_{10}H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
105	$C_8H_{10}^+$	Formação de íon tropílio substituído, caracterizando aromático alquil substituído com dois carbonos ou mais.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.

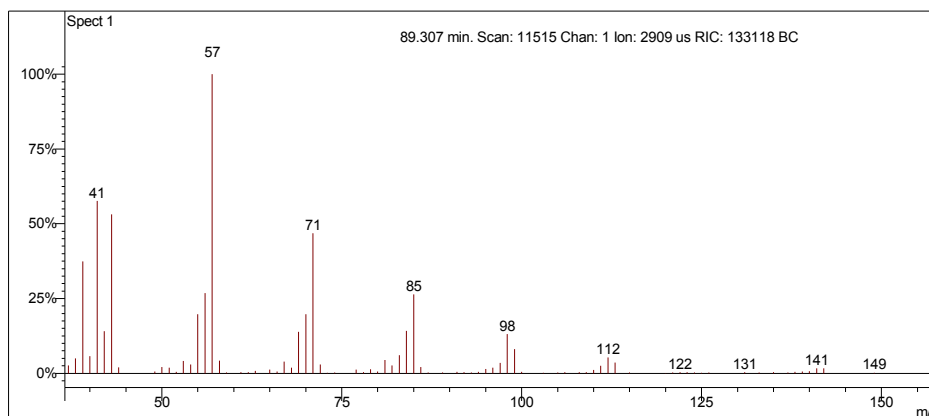
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_{10}H_{14} = C_{10}H_{15}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 134$	Transferência de carga.	Metanol
$CH_3OH^{++} + C_{10}H_{14} = C_{10}H_{14}^{++} + CH_3OH$		

Decano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 11515 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 11515, Time: 89.307 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 89.307 min. Scan: 11515 Chan: 1 Ion: 2909 us RIC: 133118 BC
Pair Count: 84 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
142 (ausente)	$[M]^+ = C_{10}H_{22}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
112	$C_8H_{16}^+$	Perda de etano.
98	$C_7H_{14}^+$	Perda de propano.
85	$C_6H_{13}^+$	Perda de butila.
71	$C_5H_{11}^+$	Perda de pentila.
57	$C_4H_9^+$	Fragmentação alílica.

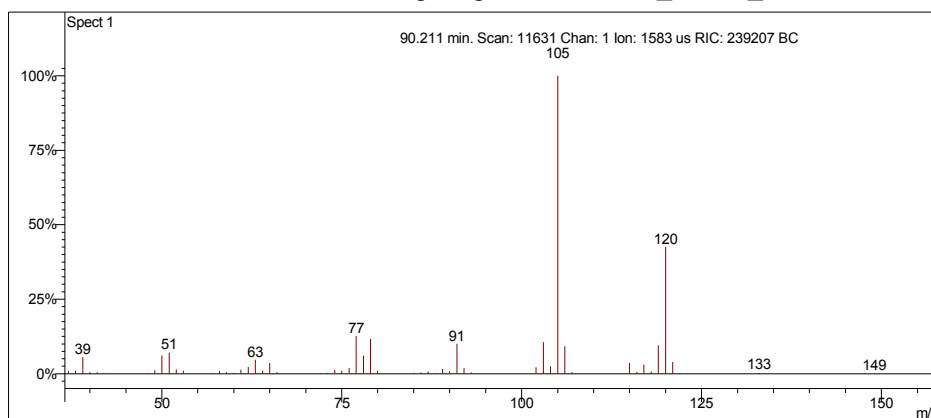
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
Sem sinal		Acetonitrila
Ionização química instável.		
Sem sinal		Metanol
Ionização química instável.		

1,2,3-trimetilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

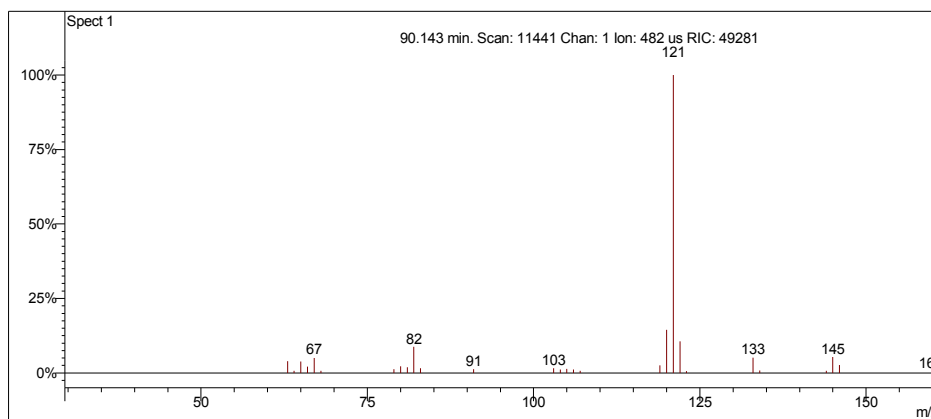
Scan 11631 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 11631, Time: 90.211 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 90.211 min. Scan: 11631 Chan: 1 Ion: 1583 us RIC: 239207 BC
Pair Count: 61 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

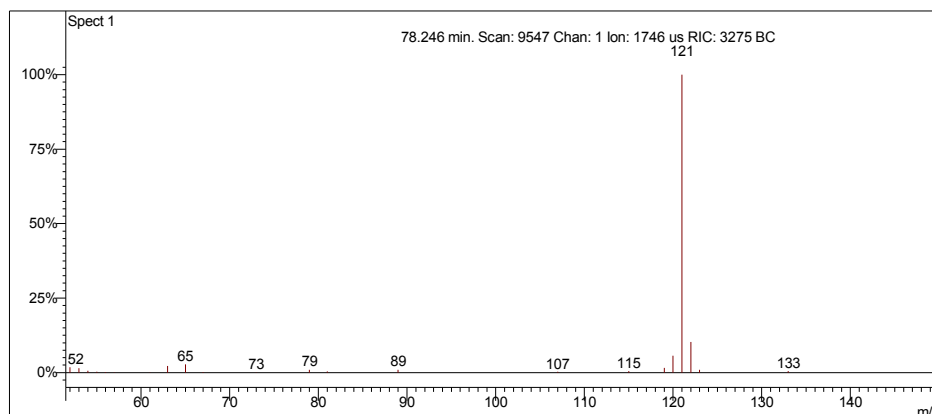
Scan 11441 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 11441, Time: 90.143 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 90.143 min. Scan: 11441 Chan: 1 Ion: 482 us RIC: 49281
Pair Count: 29 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 9547 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 9547, Time: 78.246 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 78.246 min. Scan: 9547 Chan: 1 Ion: 1746 us RIC: 3275 BC
 Pair Count: 22 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
120	$[M]^+ = C_9H_{12}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
105	$C_8H_{10}^+$	Perda de metila. Formação de íon tropílio substituído, caracterizando aromático alquil substituído com dois carbonos ou mais.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.

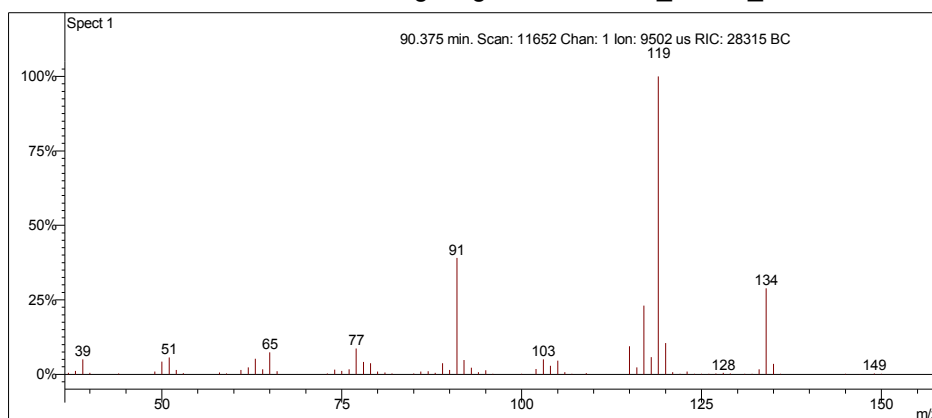
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 121$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\bullet} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \bullet\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_9\text{H}_{12} = \text{C}_9\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 121$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\bullet} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \bullet\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_9\text{H}_{12} = \text{C}_9\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

3-isopropil-1-metilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

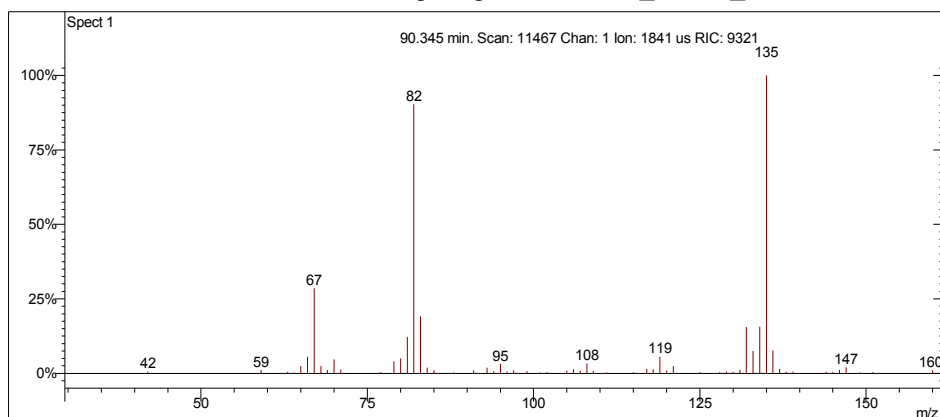
Scan 11652 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 11652, Time: 90.375 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 90.375 min. Scan: 11652 Chan: 1 Ion: 9502 us RIC: 28315 BC
Pair Count: 77 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

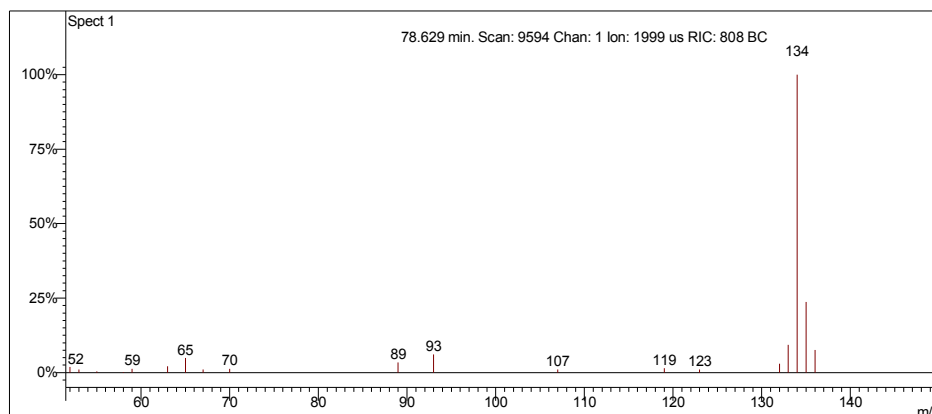
Scan 11467 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 11467, Time: 90.345 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 90.345 min. Scan: 11467 Chan: 1 Ion: 1841 us RIC: 9321
Pair Count: 61 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 9594 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 9594, Time: 78.629 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 78.629 min. Scan: 9594 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 808 BC
 Pair Count: 19 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
134	$[M]^{+} = C_{10}H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
119	$[M]^{+} = C_9H_{11}^{+}$	Perda de metila.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação de íon tropílio substituído, caracterizando aromático alquil substituído com dois carbonos ou mais.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.

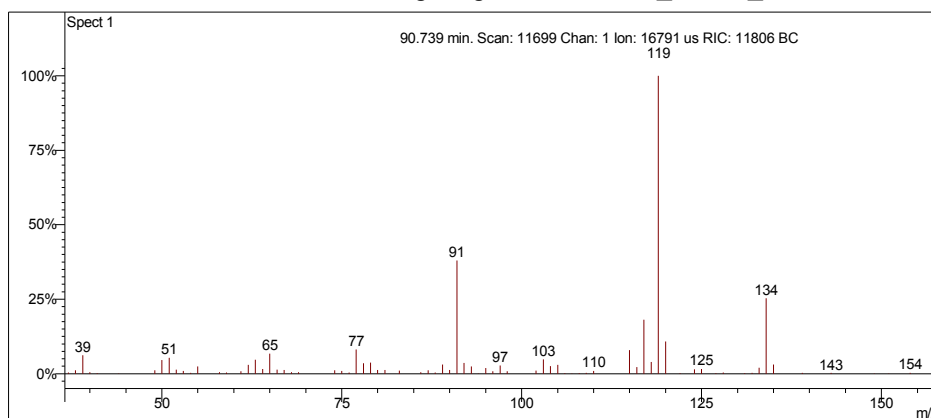
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\bullet} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 134$	Transferência de carga.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\bullet} + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{14}^{+\bullet} + \text{CH}_3\text{OH}$		

4-isopropil-1-metilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

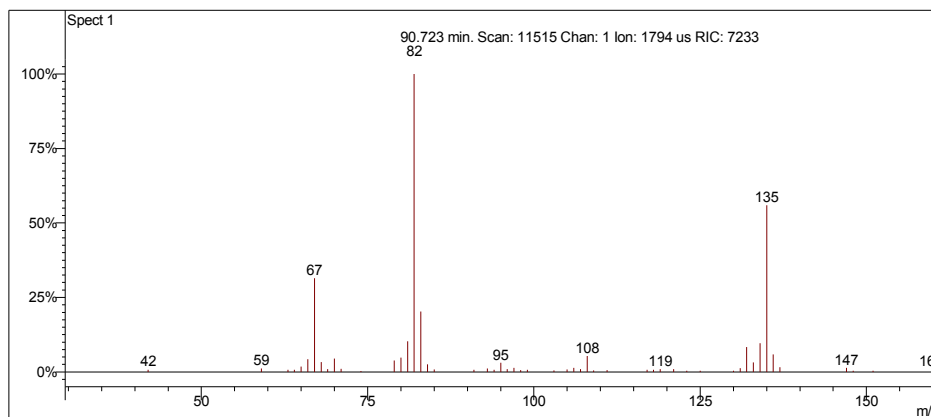
Scan 11699 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 11699, Time: 90.739 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 90.739 min. Scan: 11699 Chan: 1 Ion: 16791 us RIC: 11806 BC
Pair Count: 84 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

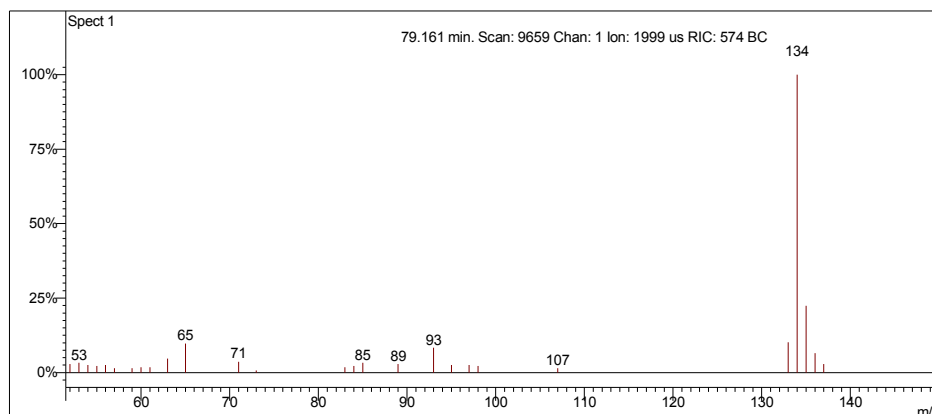
Scan 11515 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 11515, Time: 90.723 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 90.723 min. Scan: 11515 Chan: 1 Ion: 1794 us RIC: 7233
Pair Count: 52 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 9659 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 9659, Time: 79.161 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 79.161 min. Scan: 9659 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 574 BC
Pair Count: 27 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
134	$[M]^{+*} = C_{10}H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
119	$[M]^{+*} = C_9H_{11}^{+}$	Perda de metila.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação de íon tropílio substituído, caracterizando aromático alquil substituído com dois carbonos ou mais.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.

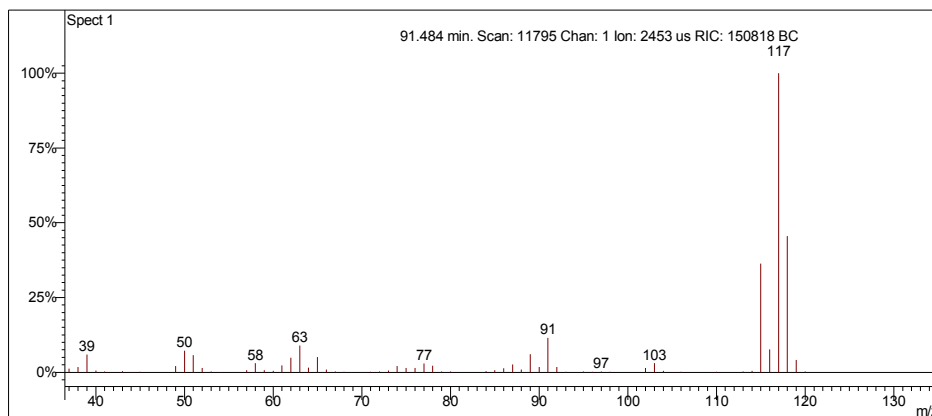
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\bullet} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 134$	Transferência de carga.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\bullet} + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{14}^{+\bullet} + \text{CH}_3\text{OH}$		

2,3-diidroindeno

Amostra de Gasolina Comum

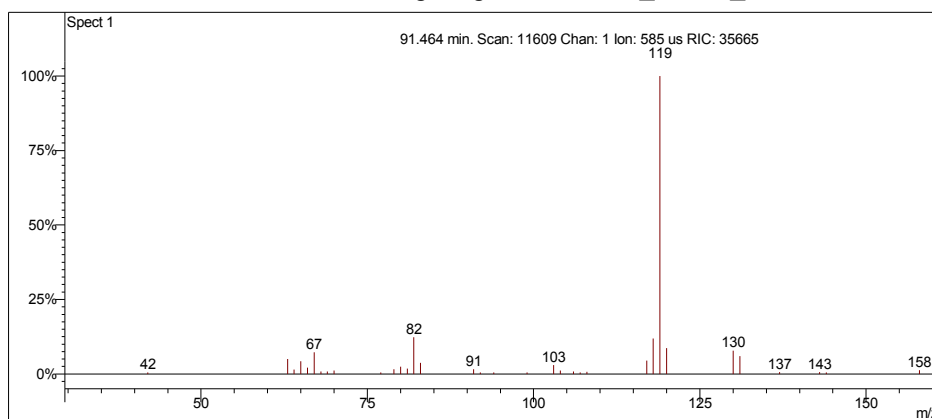
Scan 11795 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 11795, Time: 91.484 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 91.484 min. Scan: 11795 Chan: 1 Ion: 2453 us RIC: 150818 BC
Pair Count: 71 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

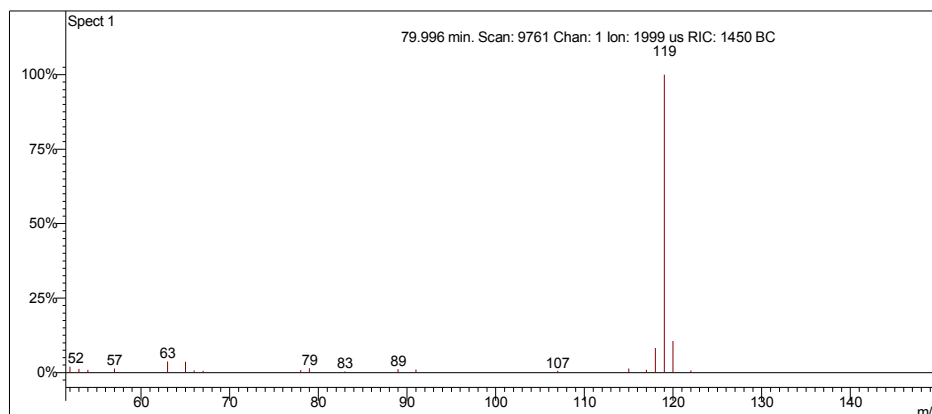
Scan 11609 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 11609, Time: 91.464 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 91.464 min. Scan: 11609 Chan: 1 Ion: 585 us RIC: 35665
Pair Count: 34 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 9761 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 9761, Time: 79.996 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 79.996 min. Scan: 9761 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1450 BC
Pair Count: 20 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
118	$[M]^+ = C_9H_{10}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
117	$[M - 1]^+ = C_9H_9^+$	Perda de hidrogênio.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
63	$C_5H_3^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.

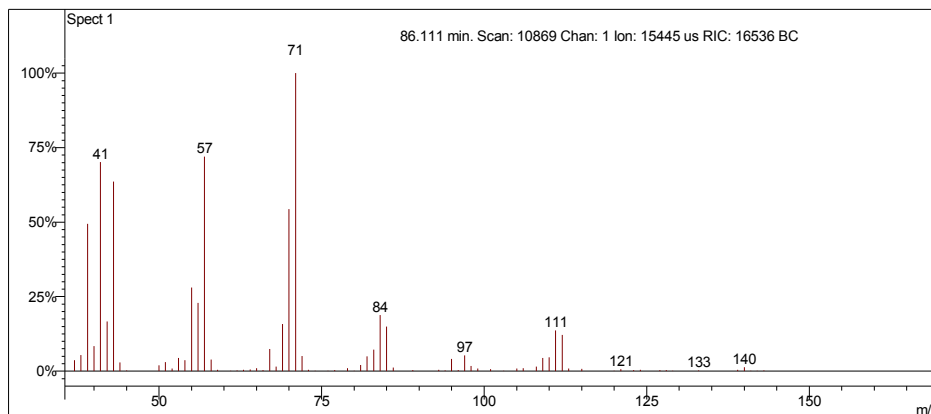
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 119$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\bullet} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \bullet\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_9\text{H}_{10} = \text{C}_9\text{H}_{11}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 119$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\bullet} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \bullet\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_9\text{H}_{10} = \text{C}_9\text{H}_{11}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 51

Amostra de Gasolina Comum

Scan 10869 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 10869, Time: 86.111 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 86.111 min. Scan: 10869 Chan: 1 Ion: 15445 us RIC: 16536 BC
Pair Count: 95 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

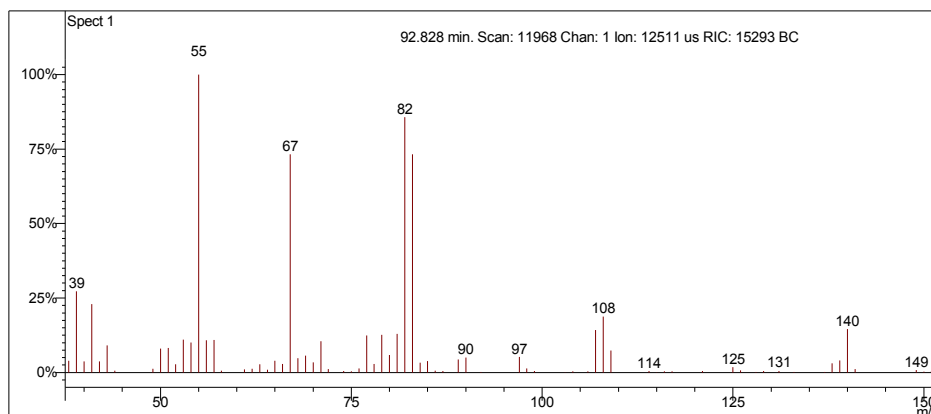
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
140	$[M]^{+} = C_{10}H_{20}^{+}$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
111	$C_8H_{15}^{+}$	Perda de etila.
97	$C_7H_{13}^{+}$	Perda de propila.
84	$C_6H_{12}^{+}$	Fragmentação alílica.
71	$C_5H_{11}^{+}$	Fragmentação alílica.
57	$C_4H_9^{+}$	Fragmentação alílica.
Conclusão: a substância é um isoparafínico com 10 carbonos.		

sec-butilcicloexano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 11968 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 11968, Time: 92.828 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 92.828 min. Scan: 11968 Chan: 1 Ion: 12511 us RIC: 15293 BC
Pair Count: 82 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

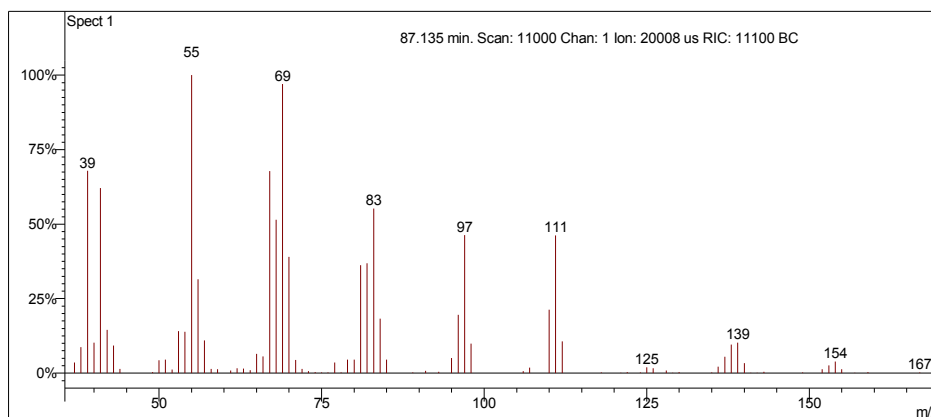
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
140	$[M]^+ = C_{10}H_{20}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
125	$[M - 15]^+ = C_9H_{17}^+$	Perda de metila.
108	$C_8H_{12}^+$	Perda de etano com rearranjos de hidrogênios.
97	$C_7H_{13}^+$	Perda de propila.
82	$C_6H_{10}^+$	Fragmentação do anel com perda de butano.
67	$C_5H_7^+$	Fragmentação do anel.

Desconhecido 52

Amostra de Gasolina Comum

Scan 11000 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
 Scan No: 11000, Time: 87.135 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 87.135 min. Scan: 11000 Chan: 1 Ion: 20008 us RIC: 11100 BC
 Pair Count: 100 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

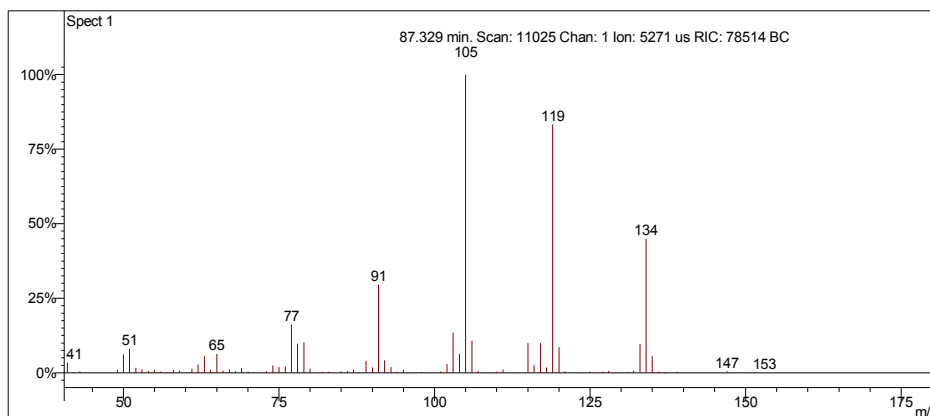
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
154	$[M]^+ = C_{11}H_{22}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
139	$C_{10}H_{19}^+$	Perda de metila
125	$C_9H_{17}^+$	Perda de etila.
111	$C_8H_{15}^+$	Perda de propila.
98	$C_7H_{14}^+$	Fragmentação alílica.
85	$C_6H_{13}^+$	Fragmentação alílica.
69	$C_5H_9^+$	Fragmentação alílica.
57	$C_4H_9^+$	Fragmentação alílica.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação alílica.
Conclusão: a substância é um isoparafínico com 11 carbonos.		

1,3-dietilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

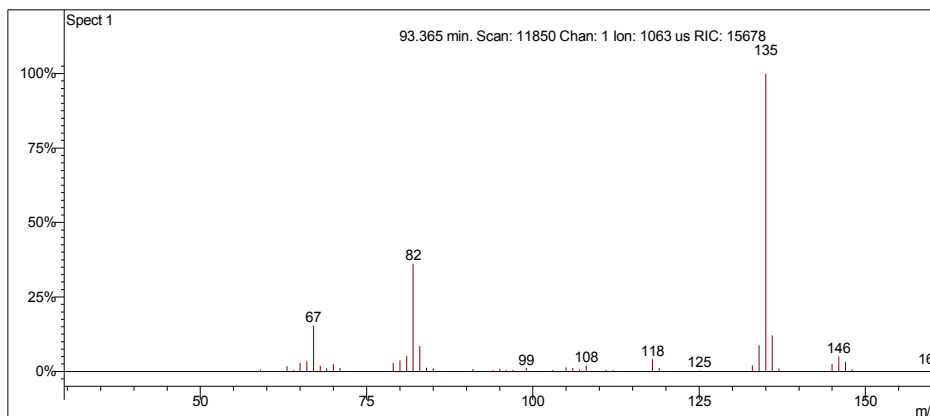
Scan 11025 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 11025, Time: 87.329 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 87.329 min. Scan: 11025 Chan: 1 Ion: 5271 us RIC: 78514 BC
Pair Count: 94 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

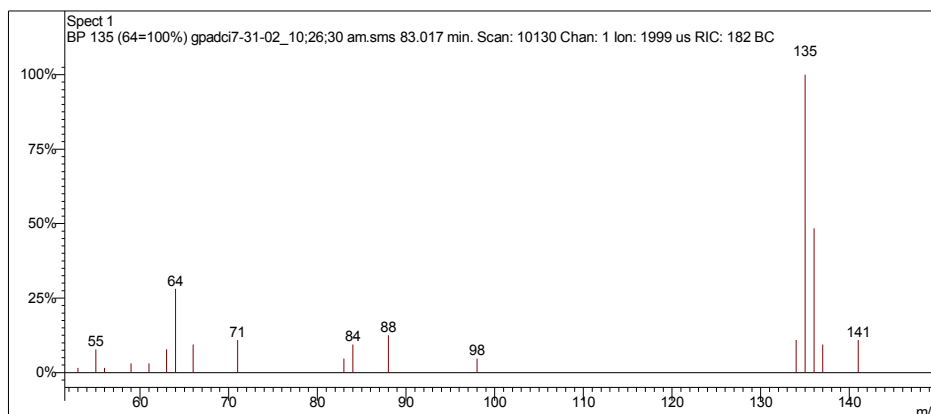
Scan 11850 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 11850, Time: 93.365 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 93.365 min. Scan: 11850 Chan: 1 Ion: 1063 us RIC: 15678
Pair Count: 43 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 10130 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 10130, Time: 83.017 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 83.017 min. Scan: 10130 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 182 BC
Pair Count: 18 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
134	$[M]^+ = C_{10}H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
119	$[M]^+ = C_9H_{11}^+$	Perda de metila.
105	$C_8H_{10}^+$	Formação de íon tropílio substituído, caracterizando aromático alquil substituído com dois carbonos ou mais.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.

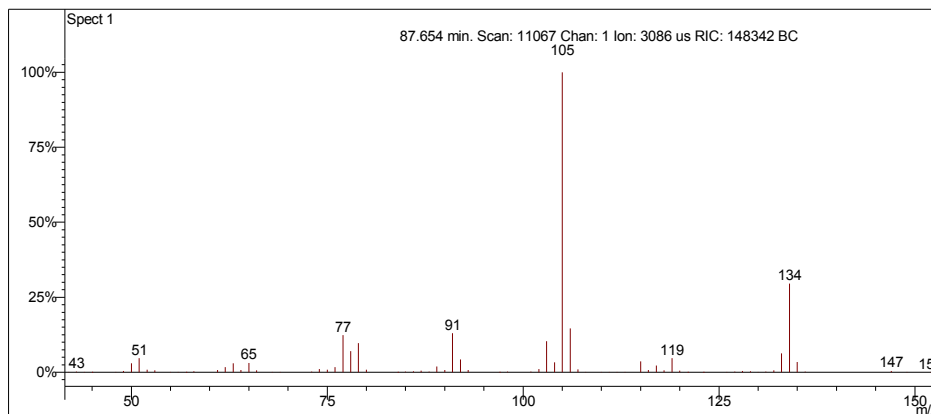
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

1-metil-3-propilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

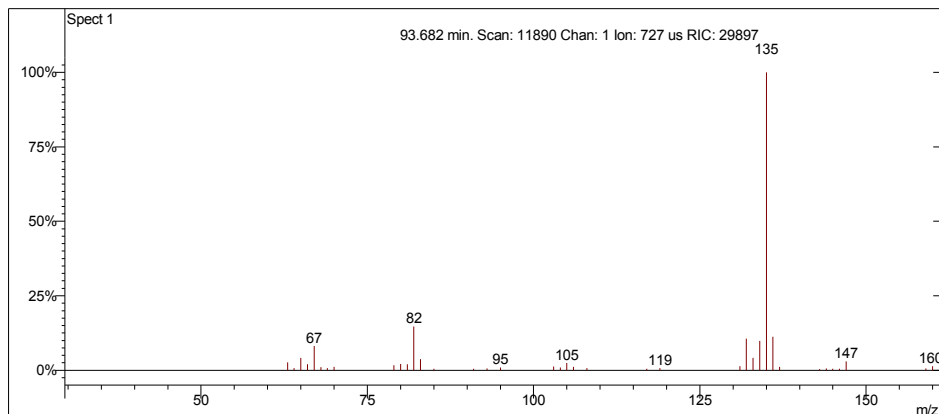
Scan 11067 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 11067, Time: 87.654 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 87.654 min. Scan: 11067 Chan: 1 Ion: 3086 us RIC: 148342 BC
Pair Count: 86 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

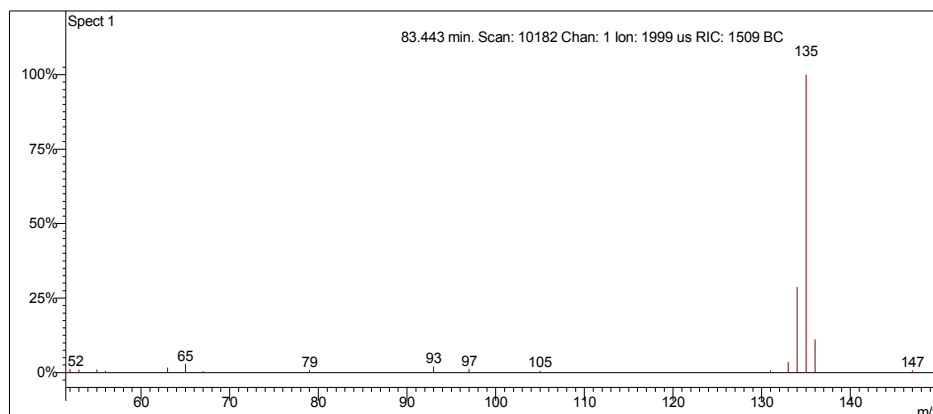
Scan 11890 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 11890, Time: 93.682 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 93.682 min. Scan: 11890 Chan: 1 Ion: 727 us RIC: 29897
Pair Count: 40 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 10182 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 10182, Time: 83.443 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 83.443 min. Scan: 10182 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1509 BC
Pair Count: 17 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
134	$[M]^{+•} = C_{10}H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
119	$[M]^{+•} = C_9H_{11}^{+}$	Perda de metila.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação de íon tropílio substituído, caracterizando aromático alquil substituído com dois carbonos ou mais.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.

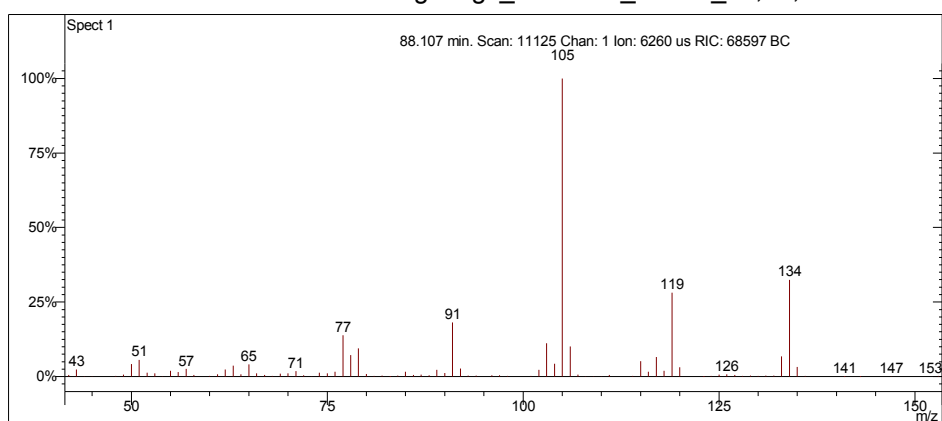
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

1,4-dietilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

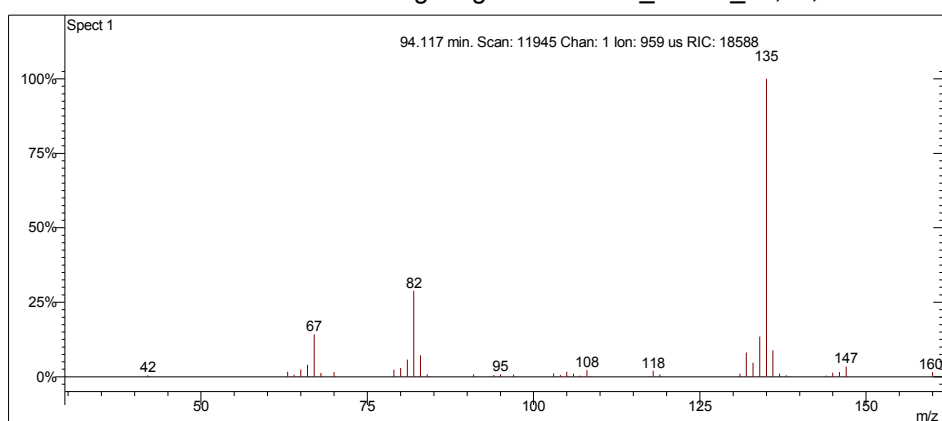
Scan 11125 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 11125, Time: 88.107 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 88.107 min. Scan: 11125 Chan: 1 Ion: 6260 us RIC: 68597 BC
Pair Count: 102 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

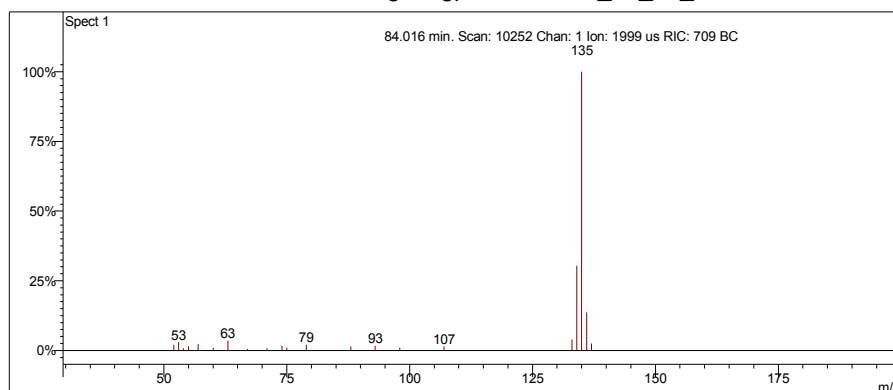
Scan 11945 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 11945, Time: 94.117 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 94.117 min. Scan: 11945 Chan: 1 Ion: 959 us RIC: 18588
Pair Count: 39 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 10252 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10_26_30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10_26_30 am.sms
Scan No: 10252, Time: 84.016 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 84.016 min. Scan: 10252 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 709 BC
Pair Count: 22 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
134	$[M]^{+} = C_{10}H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
119	$[M]^{+} = C_9H_{11}^{+}$	Perda de metila.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação de íon tropílio substituído, caracterizando aromático alquil substituído com dois carbonos ou mais.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.

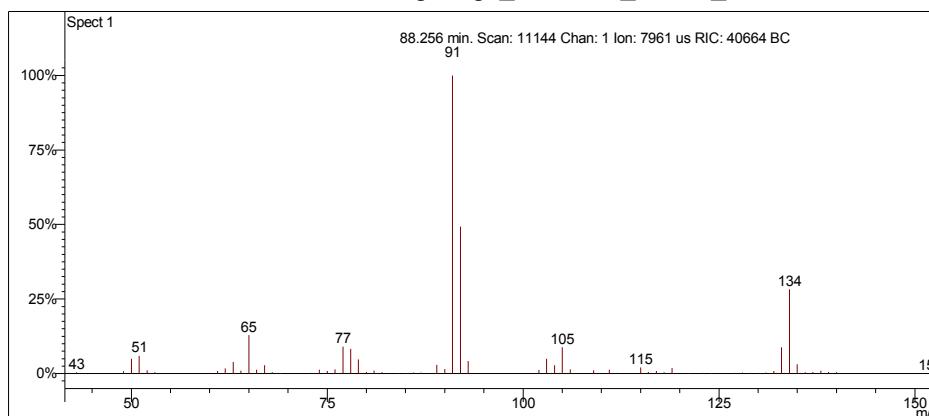
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Butilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

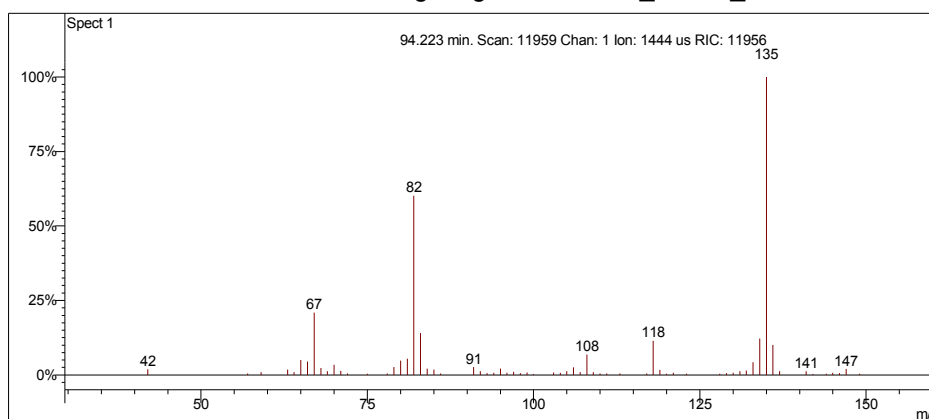
Scan 11144 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 11144, Time: 88.256 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 88.256 min. Scan: 11144 Chan: 1 Ion: 7961 us RIC: 40664 BC
Pair Count: 95 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

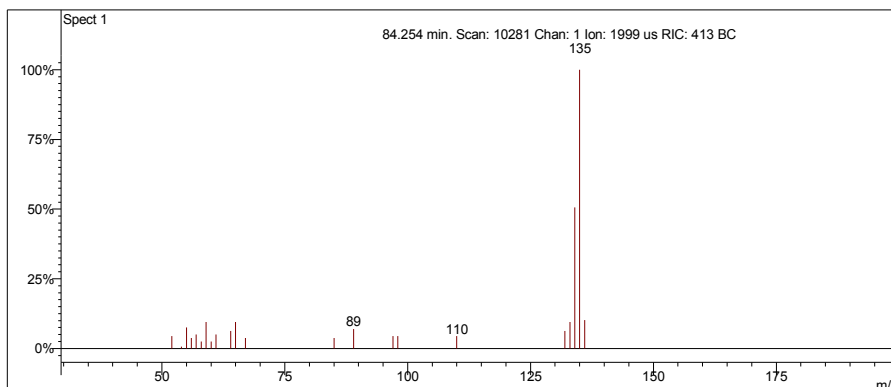
Scan 11959 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 11959, Time: 94.223 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 94.223 min. Scan: 11959 Chan: 1 Ion: 1444 us RIC: 11956
Pair Count: 68 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 10281 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10_26_30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10_26_30 am.sms
Scan No: 10281, Time: 84.254 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 84.254 min. Scan: 10281 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 413 BC
Pair Count: 22 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
134	$[M]^{+} = C_{10}H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
119	$[M]^{+} = C_9H_{11}^{+}$	Perda de metila.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação de íon tropílio substituído, caracterizando aromático alquil substituído com dois carbonos ou mais.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.

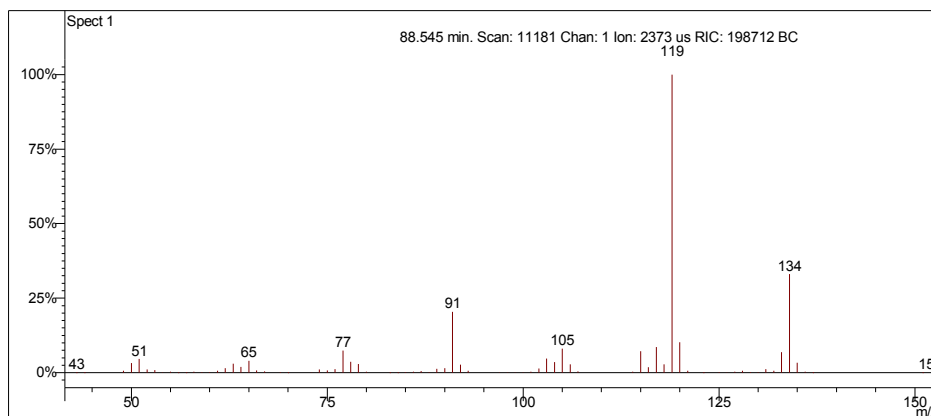
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

5-etil-1,3-dimetilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

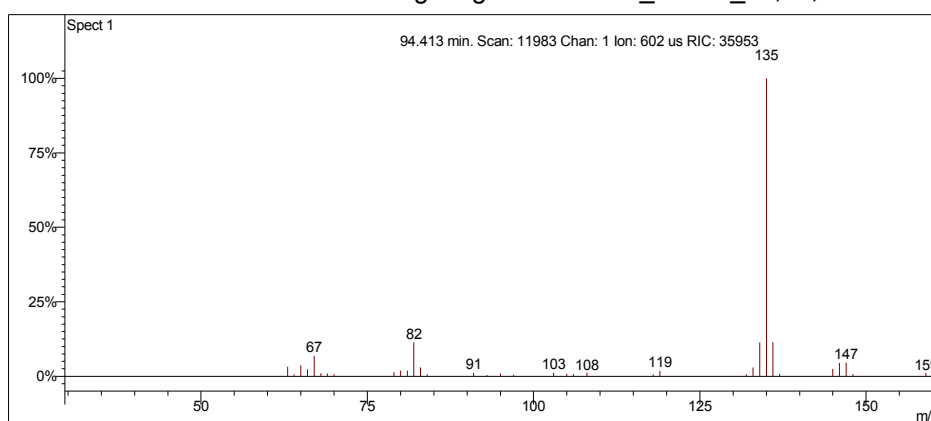
Scan 11181 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 11181, Time: 88.545 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 88.545 min. Scan: 11181 Chan: 1 Ion: 2373 us RIC: 198712 BC
Pair Count: 83 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

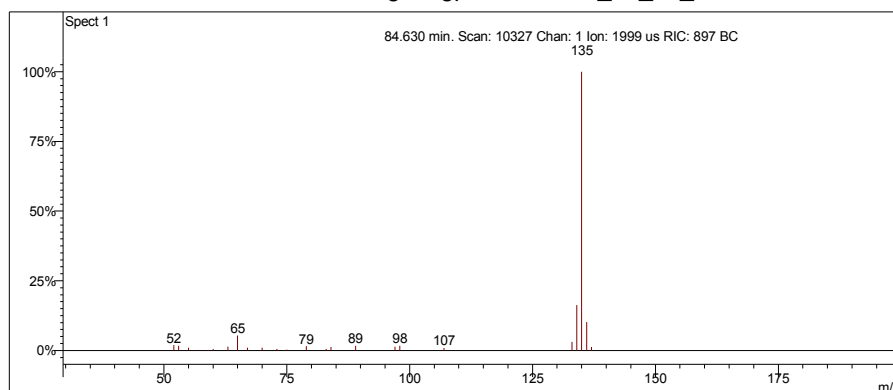
Scan 11983 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 11983, Time: 94.413 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 94.413 min. Scan: 11983 Chan: 1 Ion: 602 us RIC: 35953
Pair Count: 36 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 10327 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10_26_30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10_26_30 am.sms
Scan No: 10327, Time: 84.630 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 84.630 min. Scan: 10327 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 897 BC
Pair Count: 24 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
134	$[M]^{+*} = C_{10}H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
119	$[M]^{+*} = C_9H_{11}^+$	Perda de metila.
105	$C_8H_{10}^+$	Formação de íon tropílio substituído, caracterizando aromático alquil substituído com dois carbonos ou mais.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.

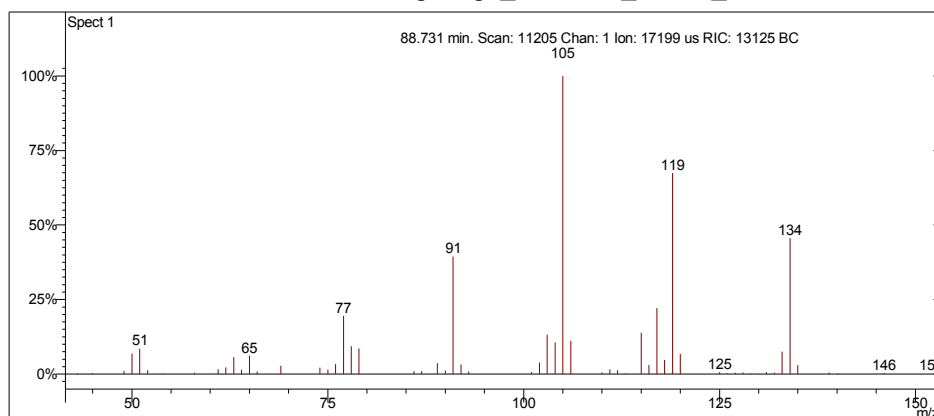
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

1,2-dietilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

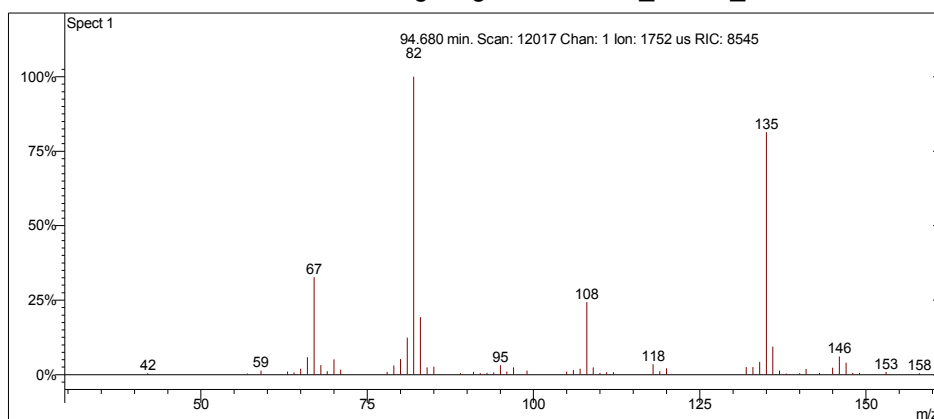
Scan 11205 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 11205, Time: 88.731 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 88.731 min. Scan: 11205 Chan: 1 Ion: 17199 us RIC: 13125 BC
Pair Count: 90 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

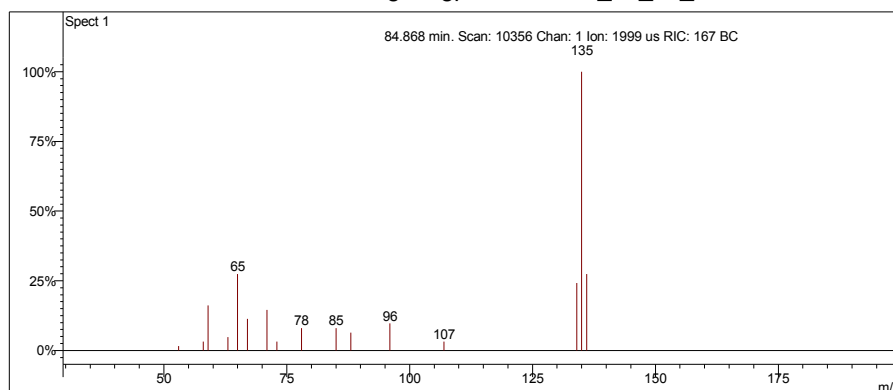
Scan 12017 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 12017, Time: 94.680 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 94.680 min. Scan: 12017 Chan: 1 Ion: 1752 us RIC: 8545
Pair Count: 59 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 10356 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10_26_30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10_26_30 am.sms
Scan No: 10356, Time: 84.868 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 84.868 min. Scan: 10356 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 167 BC
Pair Count: 16 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
134	$[M]^+ = C_{10}H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
119	$[M]^+ = C_9H_{11}^+$	Perda de metila.
105	$C_8H_{10}^+$	Formação de íon tropílio substituído, caracterizando aromático alquil substituído com dois carbonos ou mais.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.

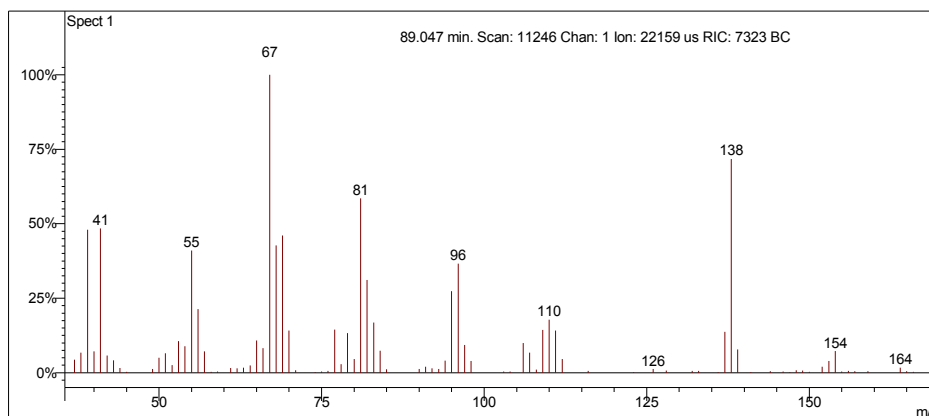
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 53

Amostra de Gasolina Comum

Scan 11246 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 11246, Time: 89.047 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 89.047 min. Scan: 11246 Chan: 1 Ion: 22159 us RIC: 7323 BC
Pair Count: 108 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

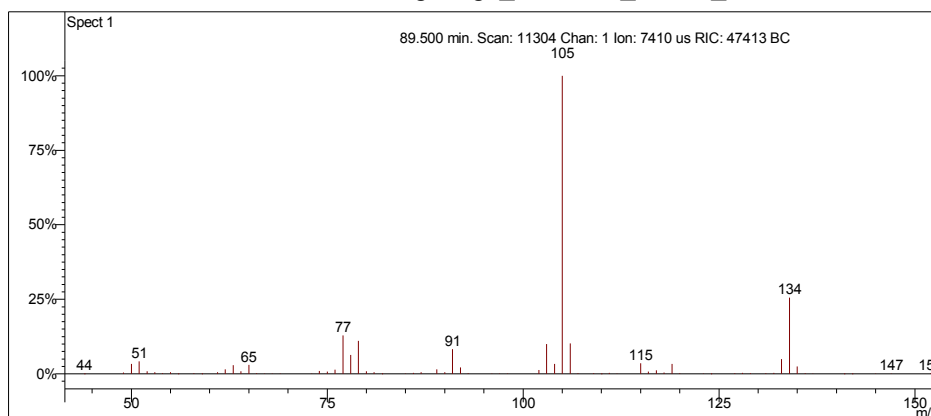
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
154	$[M]^+ = C_{11}H_{22}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
138	$C_{10}H_{18}^+$	Perda de metila
125	$C_9H_{17}^+$	Perda de etila.
110	$C_8H_{14}^+$	Perda de propano.
96	$C_7H_{12}^+$	Perda de butano.
81	$C_6H_9^+$	Perda de pentila.
67	$C_5H_7^+$	Fragmentação alílica.
55	$C_4H_7^+$	Fragmentação alílica.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação alílica.
Conclusão: a substância é um isoparafínico com 11 carbonos.		

1-metil-4-propilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

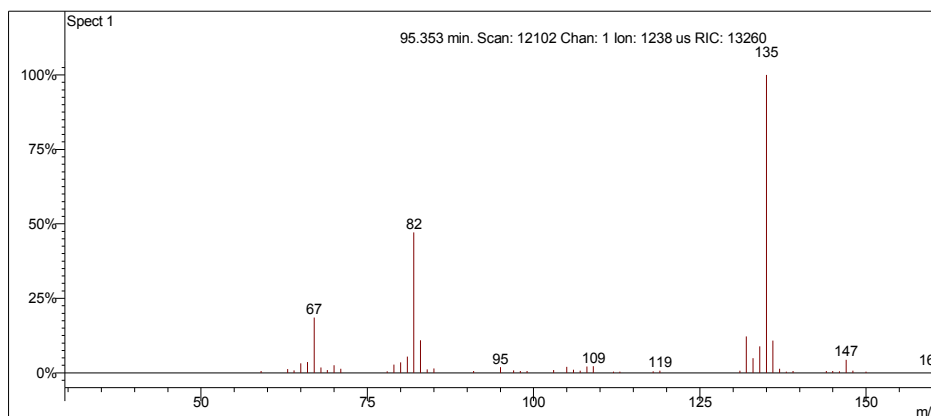
Scan 11304 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 11304, Time: 89.500 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 89.500 min. Scan: 11304 Chan: 1 Ion: 7410 us RIC: 47413 BC
Pair Count: 97 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

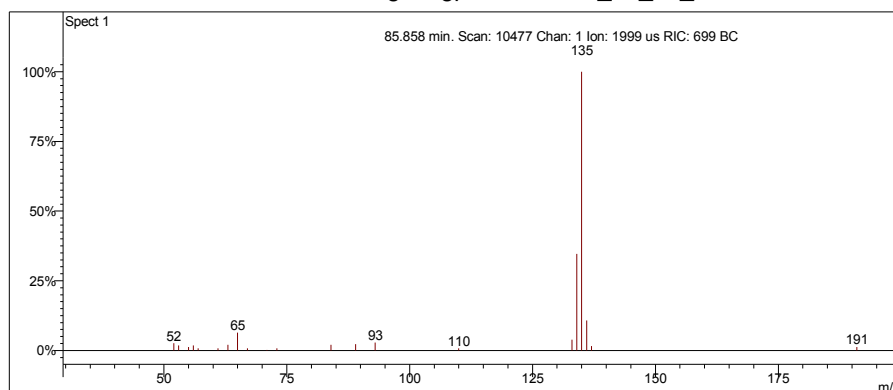
Scan 12102 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 12102, Time: 95.353 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 95.353 min. Scan: 12102 Chan: 1 Ion: 1238 us RIC: 13260
Pair Count: 51 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 10477 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10_26_30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10_26_30 am.sms
 Scan No: 10477, Time: 85.858 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 85.858 min. Scan: 10477 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 699 BC
 Pair Count: 21 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
134	$[M]^+ = C_{10}H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
105	$C_8H_{10}^+$	Formação de íon tropílio substituído, caracterizando aromático alquil substituído com dois carbonos ou mais.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.

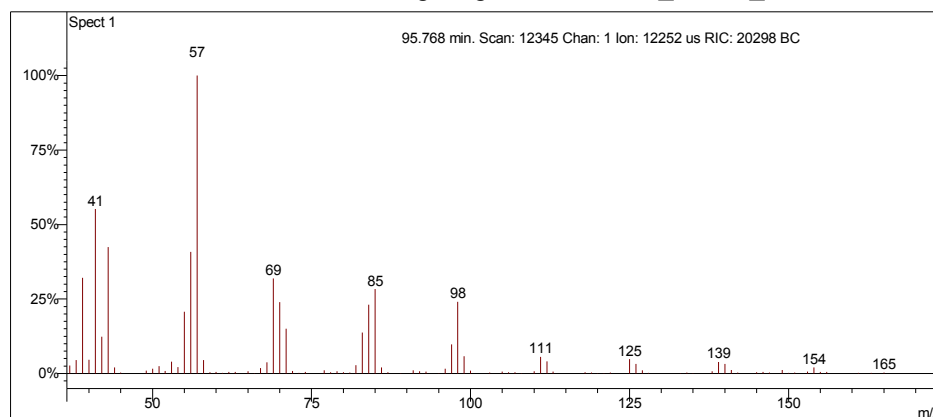
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 54

Amostra de Gasolina Comum

Scan 12345 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 12345, Time: 95.768 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 95.768 min. Scan: 12345 Chan: 1 Ion: 12252 us RIC: 20298 BC
Pair Count: 101 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

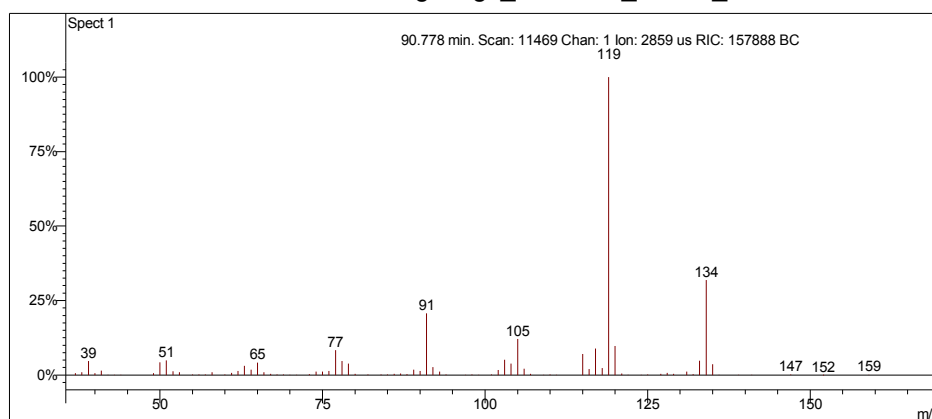
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
154	$[M]^+ = C_{11}H_{22}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
139	$[M - 15]^+ = C_{10}H_{19}^+$	Perda de metila
125	$[M - 29]^+ = C_9H_{17}^+$	Perda de etila.
111	$C_8H_{15}^+$	Perda de propila.
98	$C_7H_{14}^+$	Fragmentação alílica com rearranjo de hidrogênio.
85	$C_6H_{13}^+$	Fragmentação alílica com rearranjo de hidrogênio.
69	$C_5H_9^+$	Fragmentação alílica com rearranjo de hidrogênio.
57	$C_4H_9^+$	Fragmentação alílica.
41	$C_3H_5^+$	Fragmentação alílica.
Conclusão: a substância é um isoparafínico com 11 carbonos.		

2-etil-1,4-dimetilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

Scan 11469 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms

Scan No: 11469, Time: 90.778 minutes

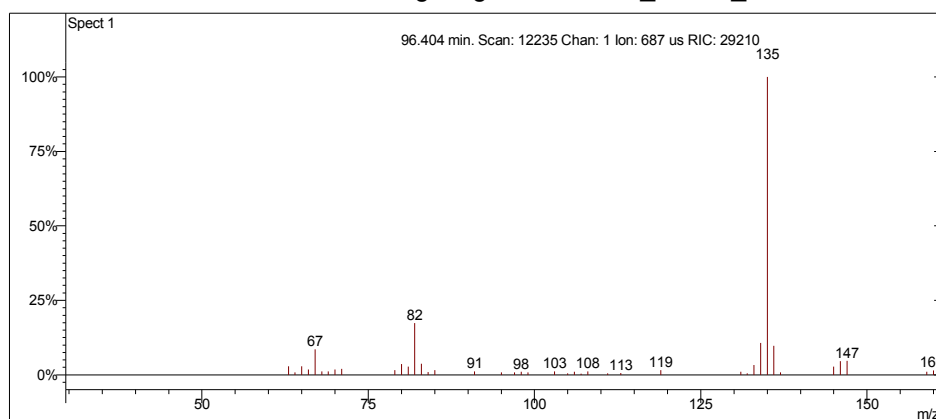
No averaging. Background corrected.

Comment: 90.778 min. Scan: 11469 Chan: 1 Ion: 2859 us RIC: 157888 BC

Pair Count: 90 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 12235 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms

Scan No: 12235, Time: 96.404 minutes

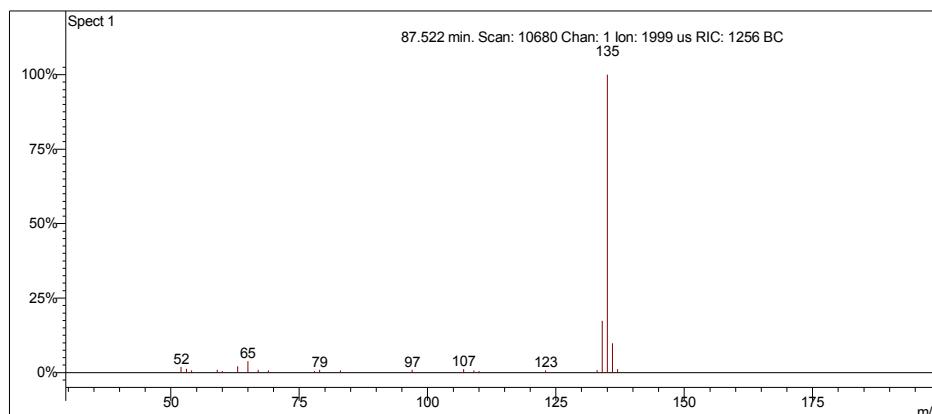
No averaging. Not background corrected.

Comment: 96.404 min. Scan: 12235 Chan: 1 Ion: 687 us RIC: 29210

Pair Count: 42 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 10680 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 10680, Time: 87.522 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 87.522 min. Scan: 10680 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1256 BC
 Pair Count: 24 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
134	$[M]^{+} = C_{10}H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
119	$[M]^{+} = C_9H_{11}^{+}$	Perda de metila.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.

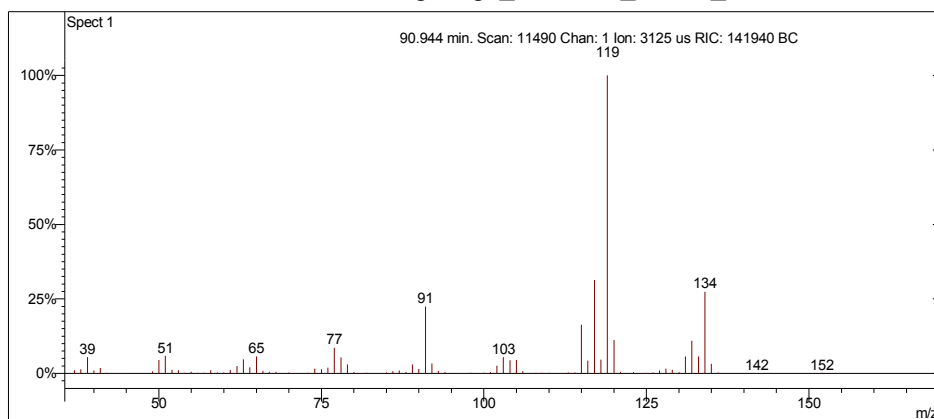
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

4-etil-1,3-dimetilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

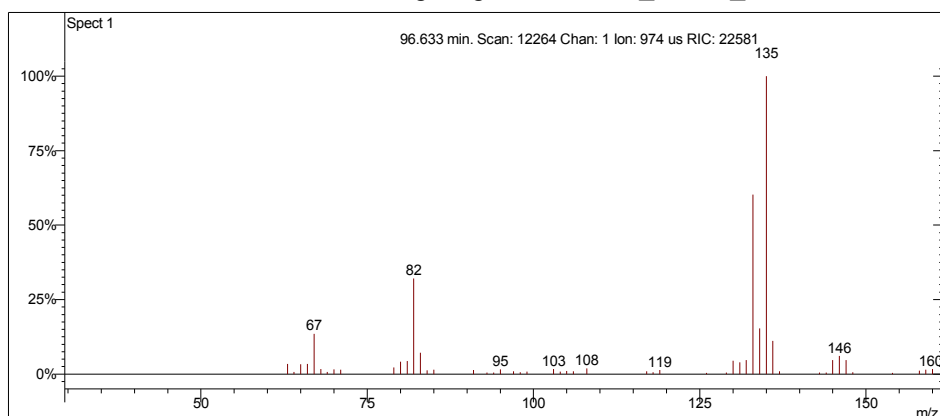
Scan 11490 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 11490, Time: 90.944 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 90.944 min. Scan: 11490 Chan: 1 Ion: 3125 us RIC: 141940 BC
Pair Count: 101 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

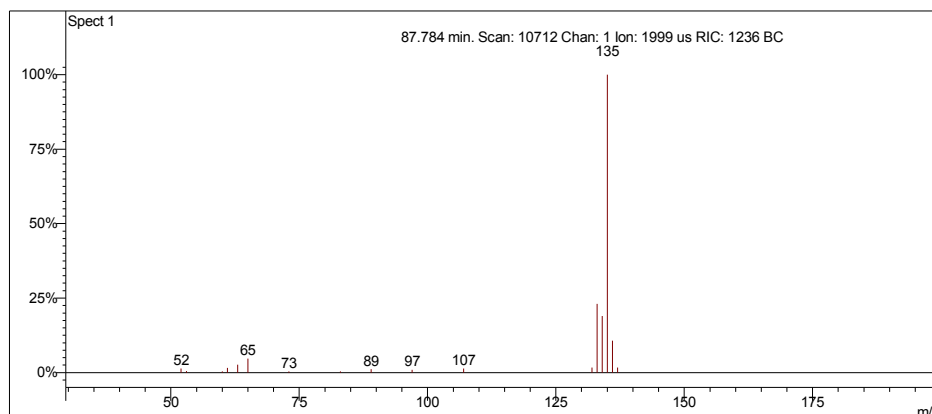
Scan 12264 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 12264, Time: 96.633 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 96.633 min. Scan: 12264 Chan: 1 Ion: 974 us RIC: 22581
Pair Count: 53 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 10712 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 10712, Time: 87.784 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 87.784 min. Scan: 10712 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1236 BC
 Pair Count: 17 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
134	$[M]^{+} = C_{10}H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
119	$[M]^{+} = C_9H_{11}^{+}$	Perda de metila.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.

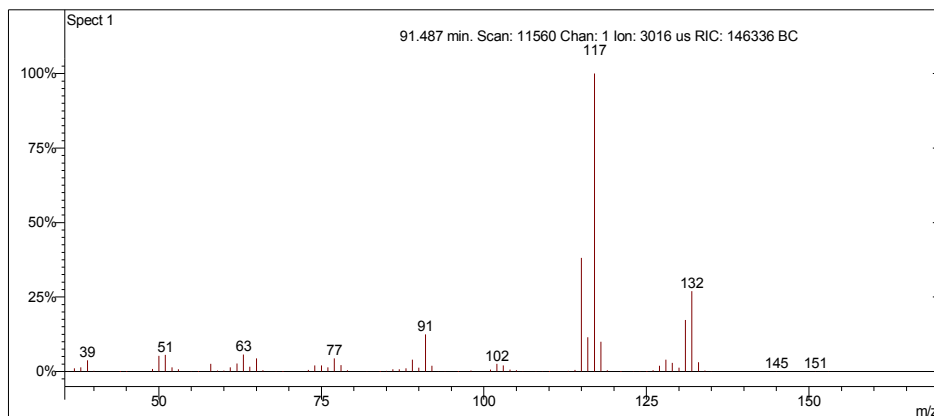
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

4-etenil-1,3-dimetilbenzeno (2,4-dimetilestireno)

Amostra de Gasolina Comum

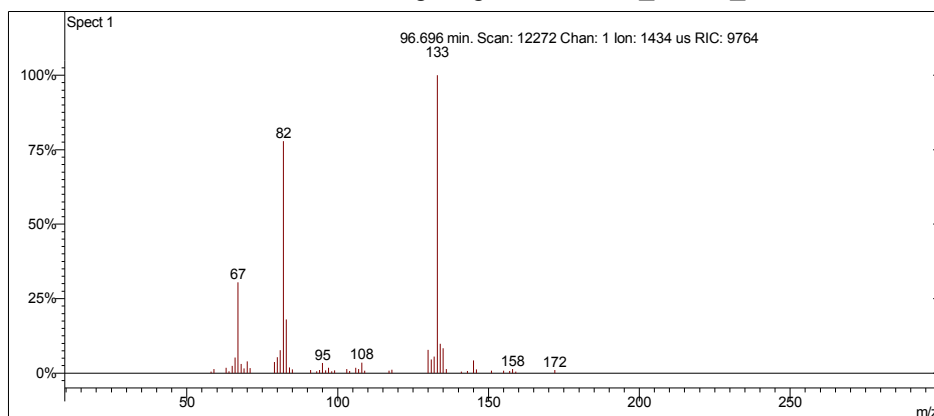
Scan 11560 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 11560, Time: 91.487 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 91.487 min. Scan: 11560 Chan: 1 Ion: 3016 us RIC: 146336 BC
Pair Count: 85 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 12272 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 12272, Time: 96.696 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 96.696 min. Scan: 12272 Chan: 1 Ion: 1434 us RIC: 9764
Pair Count: 51 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
132	$[M]^{+} = C_{10}H_{12}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
117	$[M]^{+} = C_9H_{11}^{+}$	Perda de metila.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.

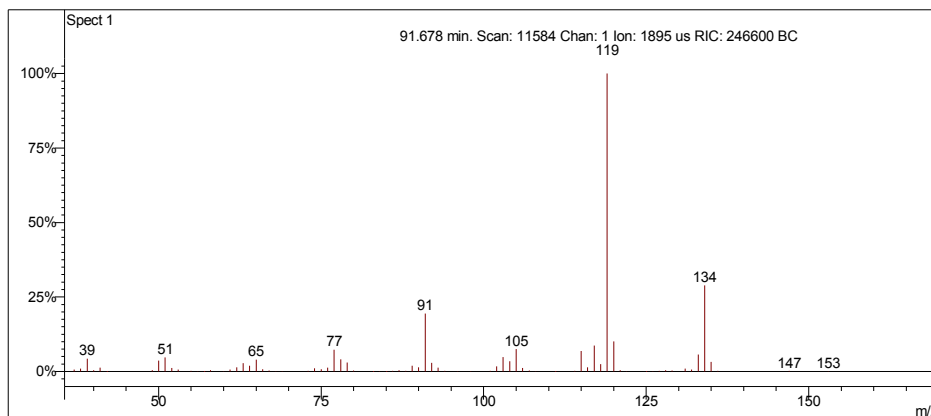
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 133$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_{10}H_{12} = C_{10}H_{13}^{+} + CH_3CN$		
sem sinal		Metanol
Quantidade desprezível.		

4-etil-1,2-dimetilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

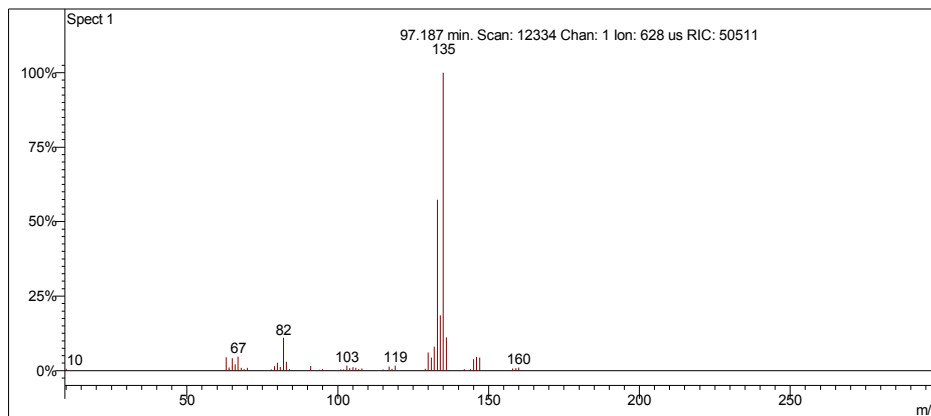
Scan 11584 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 11584, Time: 91.678 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 91.678 min. Scan: 11584 Chan: 1 Ion: 1895 us RIC: 246600 BC
Pair Count: 80 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

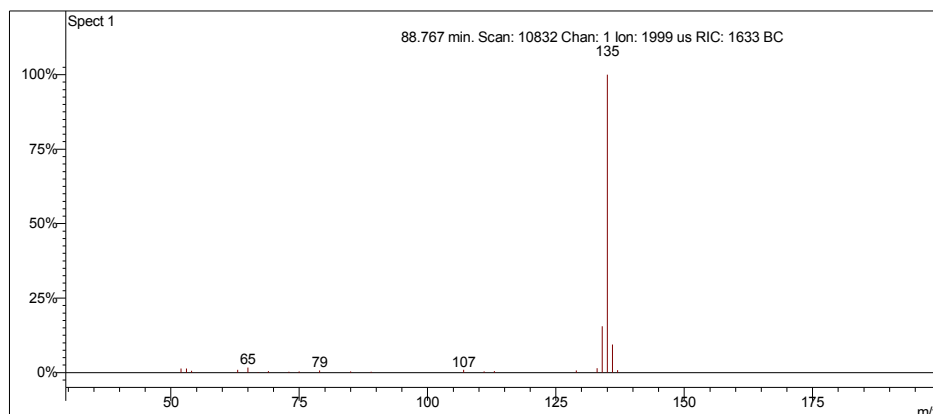
Scan 12334 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 12334, Time: 97.187 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 97.187 min. Scan: 12334 Chan: 1 Ion: 628 us RIC: 50511
Pair Count: 47 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 10832 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 10832, Time: 88.767 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 88.767 min. Scan: 10832 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1633 BC
Pair Count: 22 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
134	$[M]^{+•} = C_{10}H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
119	$[M]^{+•} = C_9H_{11}^{+}$	Perda de metila.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.

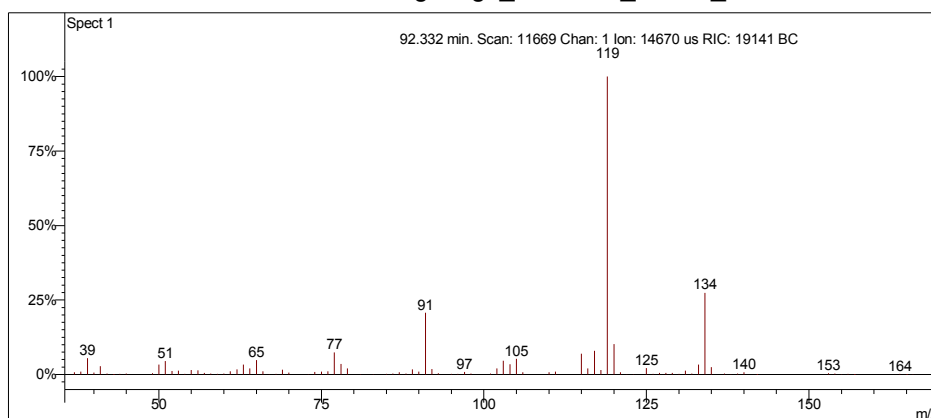
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

2-etil-1,3-dimetilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

Scan 11669 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms

Scan No: 11669, Time: 92.332 minutes

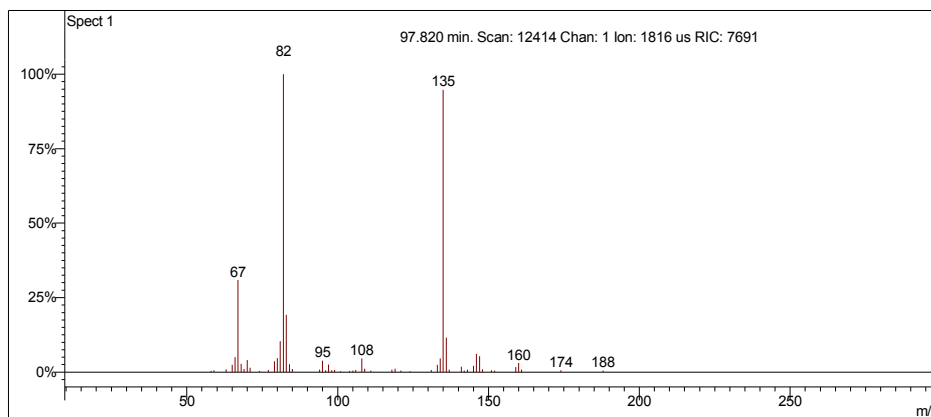
No averaging. Background corrected.

Comment: 92.332 min. Scan: 11669 Chan: 1 Ion: 14670 us RIC: 19141 BC

Pair Count: 106 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 12414 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciact_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciact_9-6-06_10;56;22 am.sms

Scan No: 12414, Time: 97.820 minutes

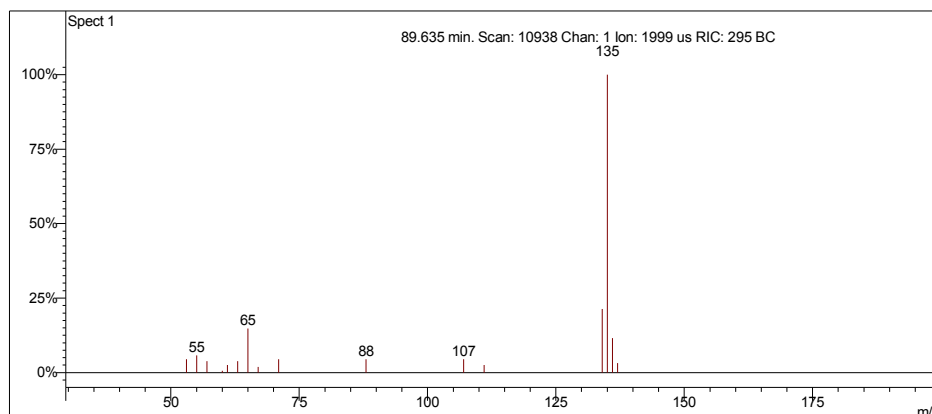
No averaging. Not background corrected.

Comment: 97.820 min. Scan: 12414 Chan: 1 Ion: 1816 us RIC: 7691

Pair Count: 56 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 10938 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 10938, Time: 89.635 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 89.635 min. Scan: 10938 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 295 BC
Pair Count: 16 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
134	$[M]^{+} = C_{10}H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
119	$[M]^{+} = C_9H_{11}^{+}$	Perda de metila.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.

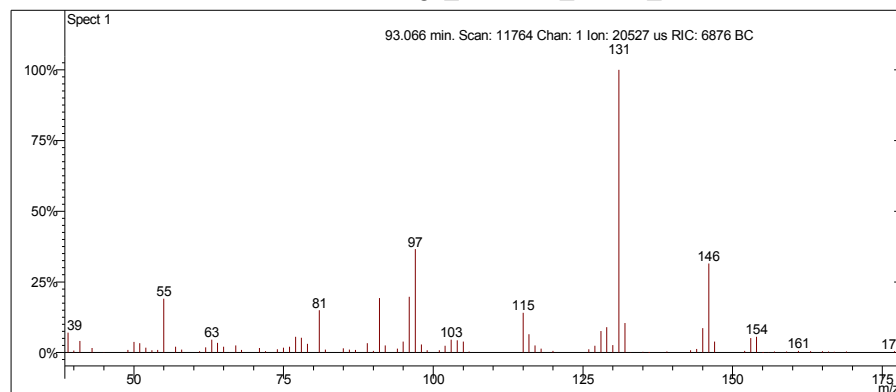
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 55

Amostra de Gasolina Comum

Scan 11764 from d:\lilian\doutorado\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from d:\... \gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
 Scan No: 11764, Time: 93.066 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 93.066 min, Scan: 11764 Chan: 1 Ion: 20527 us RIC: 6876 BC
 Pair Count: 103 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

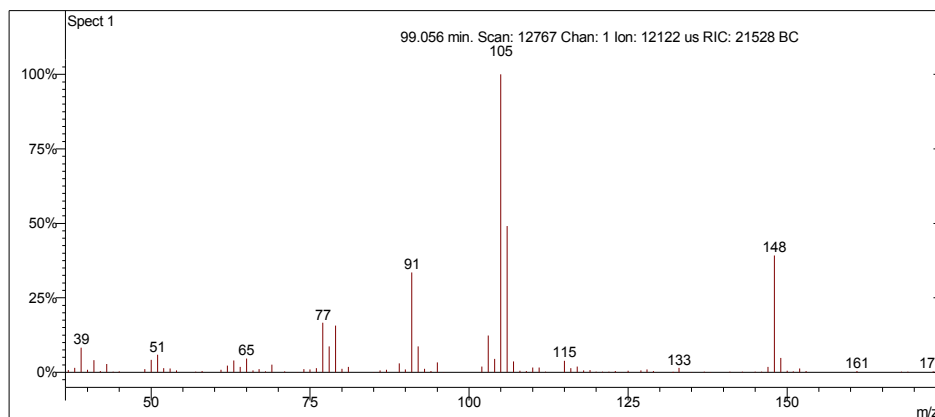
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
146	$[M]^+ = C_{11}H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
131	$[M-15]^+ = C_{10}H_{11}^+$	Perda de metila.
115	$C_9H_7^+$	Perda de etila com rearranjo de hidrogênio.
97		Contaminação de outra substância.
81		Contaminação de outra substância.
<p>Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 11 carbonos, coelui com outra substância.</p>		

Desconhecido 56

Amostra de Gasolina Comum

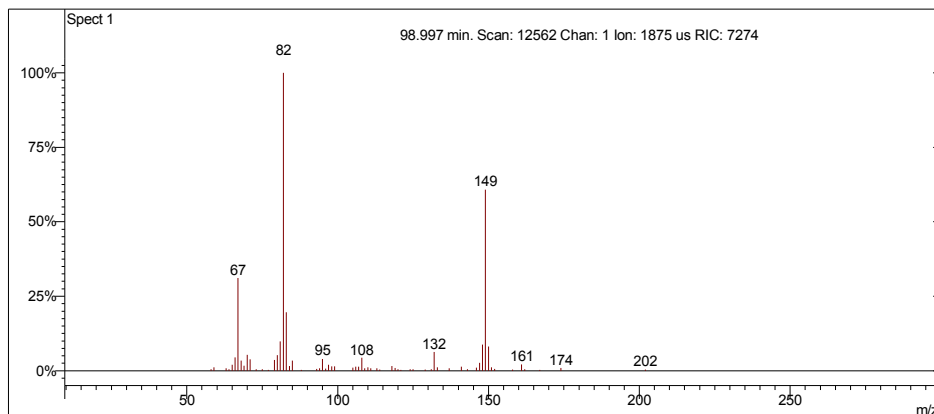
Scan 12767 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 12767, Time: 99.056 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 99.056 min. Scan: 12767 Chan: 1 Ion: 12122 us RIC: 21528 BC
Pair Count: 99 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

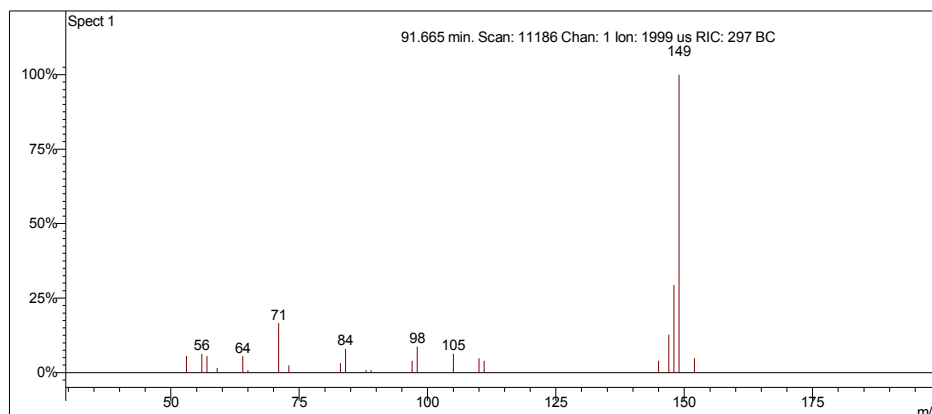
Scan 12562 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 12562, Time: 98.997 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 98.997 min. Scan: 12562 Chan: 1 Ion: 1875 us RIC: 7274
Pair Count: 64 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 11186 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 11186, Time: 91.665 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 91.665 min. Scan: 11186 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 297 BC
Pair Count: 22 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
148	$[M]^{+*} = C_{11}H_{16}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
133	$[M-15]^{+} = C_{10}H_{13}^{+}$	Perda de metila.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 11 carbonos.		

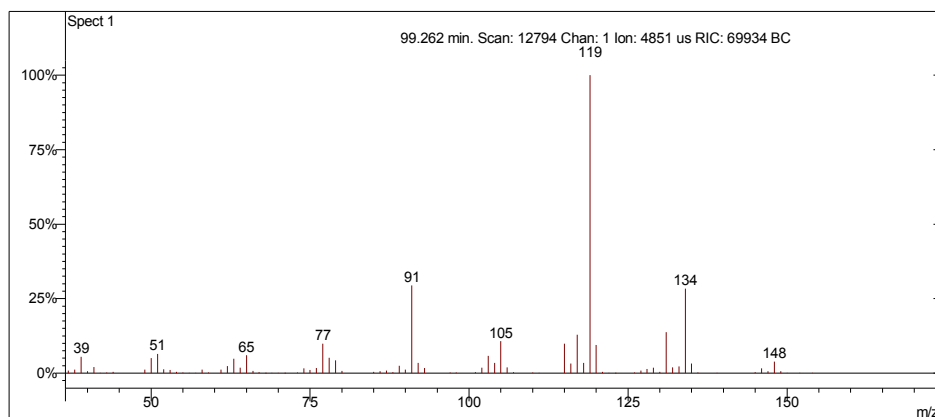
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 149$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\bullet} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \bullet\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{16} = \text{C}_{11}\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 149$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\bullet} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \bullet\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{16} = \text{C}_{11}\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 57

Amostra de Gasolina Comum

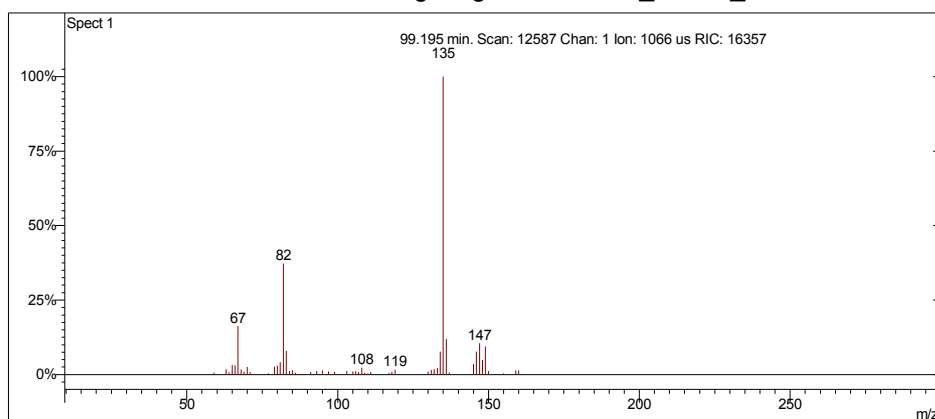
Scan 12794 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 12794, Time: 99,262 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 99.262 min. Scan: 12794 Chan: 1 Ion: 4851 us RIC: 69934 BC
Pair Count: 92 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

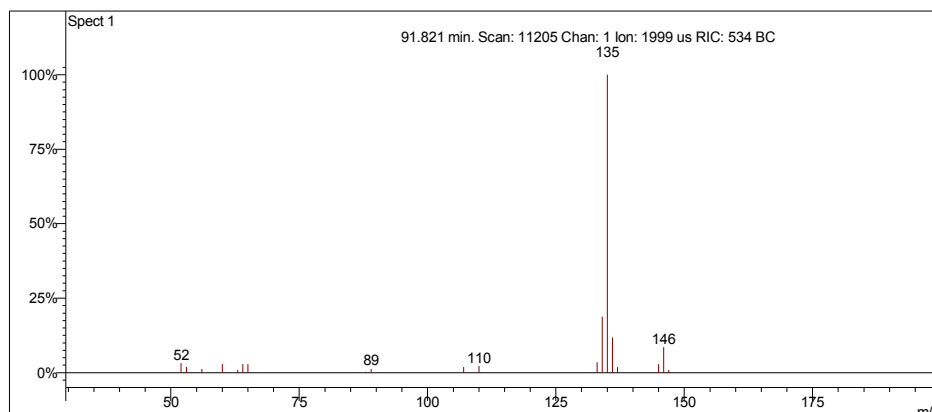
Scan 12587 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 12587, Time: 99,195 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 99.195 min. Scan: 12587 Chan: 1 Ion: 1066 us RIC: 16357
Pair Count: 52 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 11205 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 11205, Time: 91.821 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 91.821 min. Scan: 11205 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 534 BC
Pair Count: 19 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
148	$C_{11}H_{16}^+$	Contaminação de outro aromático.
134	$[M]^+ = C_{10}H_{13}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
119	$[M-15]^+ = C_9H_{11}^+$	Perda de metila.
105	$C_8H_{10}^+$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.
<p>Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 10 carbonos. Coelui com outro aromático.</p>		

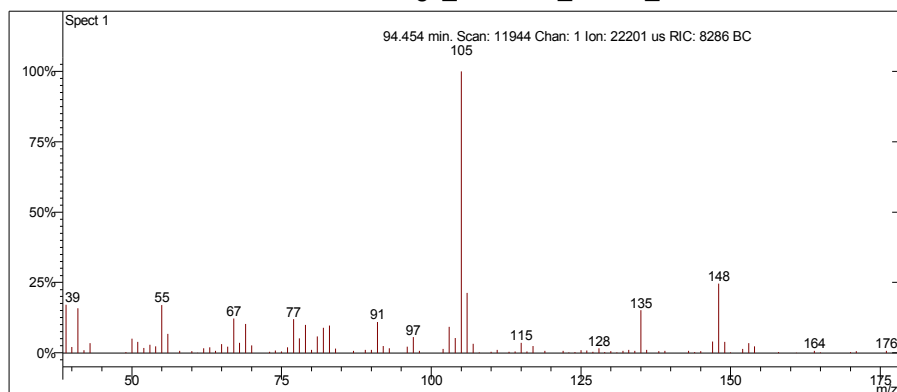
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 58

Amostra de Gasolina Comum

Scan 11944 from d:\lilian\doutorado\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from d:\... \gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
 Scan No: 11944, Time: 94.454 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 94.454 min. Scan: 11944 Chan: 1 Ion: 22201 us RIC: 8286 BC
 Pair Count: 117 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

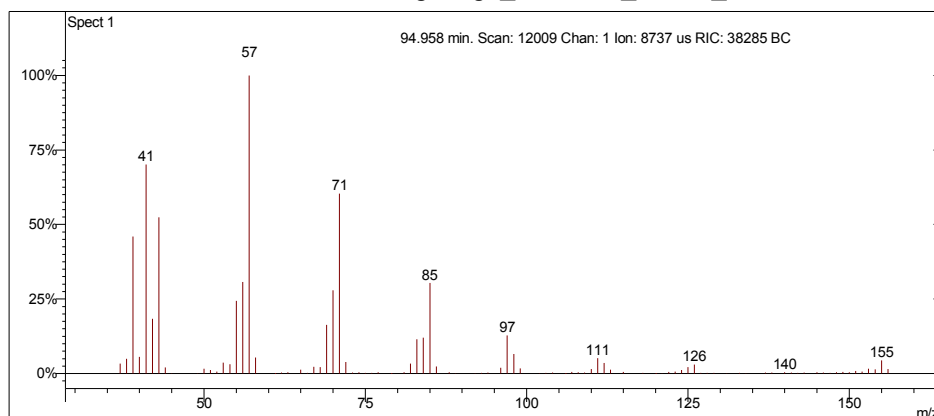
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
Íon m/z	Fragmento	Observação
148	$[M]^+ = C_{11}H_{16}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
135		Contaminação outro aromático
105	$C_8H_{10}^+$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 11 carbonos. Coelui com outro aromático.		

Undecano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 12009 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 12009, Time: 94.958 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 94.958 min. Scan: 12009 Chan: 1 Ion: 8737 us RIC: 38285 BC
Pair Count: 107 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

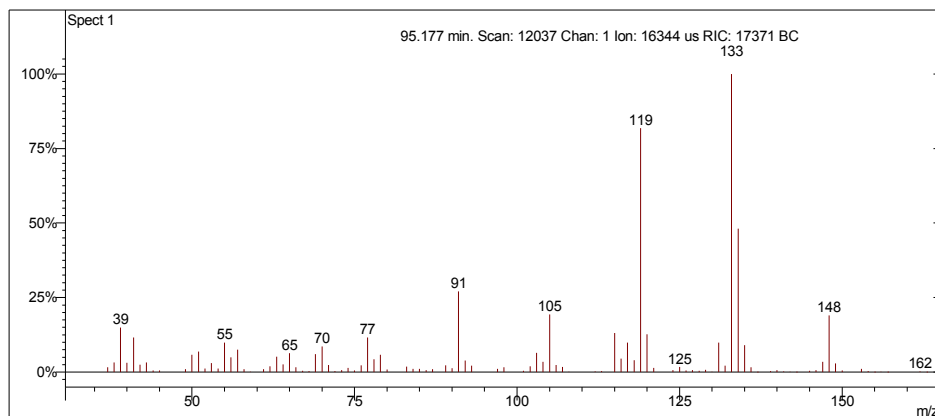
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
156	$[M]^{++} = C_{11}H_{24}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
126	$[M - 30]^+ = C_9H_{18}^+$	Perda de etano.
111	$C_8H_{15}^+$	Perda de propano com rearranjo.
97	$C_7H_{13}^+$	Perda de propano com rearranjo.
85	$C_6H_{13}^+$	Perda de pentila.
71	$C_5H_{11}^+$	Fragmentação alílica.
57	$C_4H_9^+$	Fragmentação alílica.

1-etil-4-isopropilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

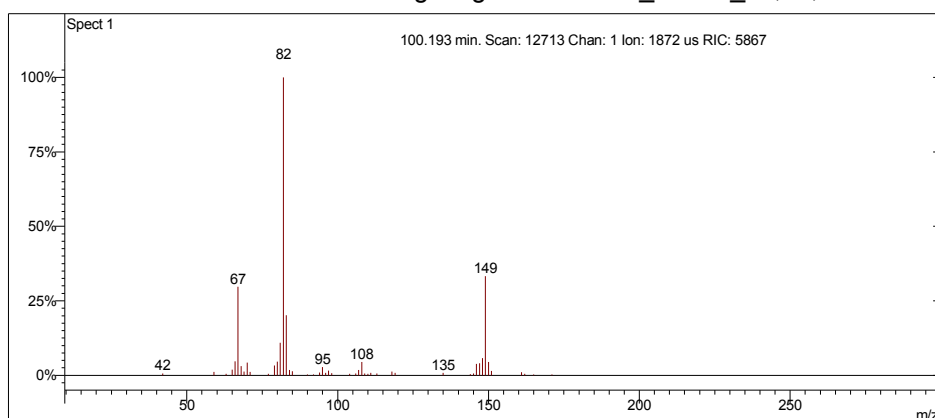
Scan 12037 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 12037, Time: 95.177 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 95.177 min. Scan: 12037 Chan: 1 Ion: 16344 us RIC: 17371 BC
Pair Count: 115 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

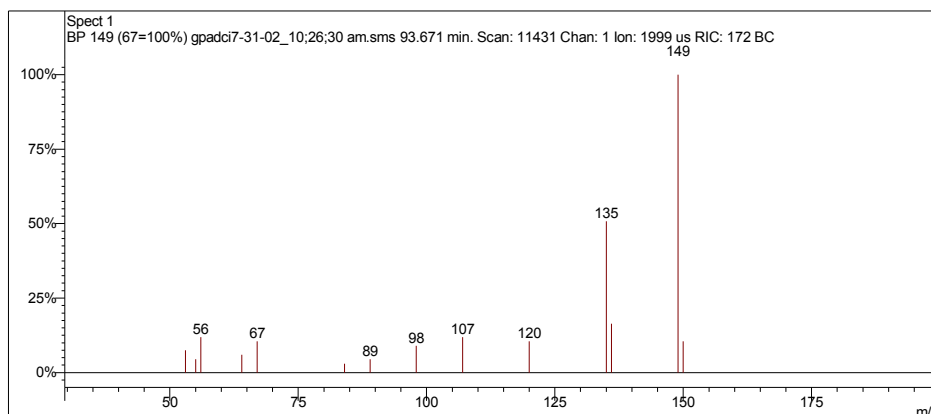
Scan 12713 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 12713, Time: 100.193 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 100.193 min. Scan: 12713 Chan: 1 Ion: 1872 us RIC: 5867
Pair Count: 48 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 11431 from c:\... \amostras\cgms\gpacdi7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpacdi7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 11431, Time: 93.671 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 93.671 min. Scan: 11431 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 172 BC
Pair Count: 14 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
148	$[M]^+ = C_{11}H_{16}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
133	$[M-15]^+ = C_{10}H_{13}^+$	Perda de metila.
119	$C_9H_{11}^+$	Perda de etila.
105	$C_8H_{10}^+$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.

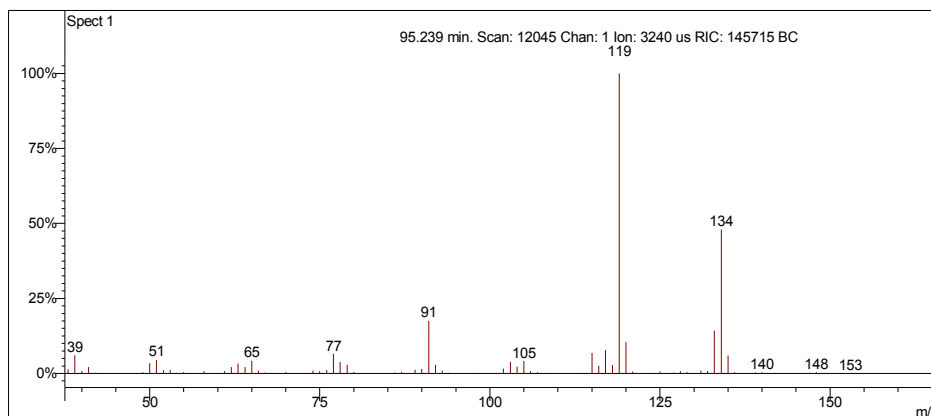
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 149$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{16} = \text{C}_{11}\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 149$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{16} = \text{C}_{11}\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

1,2,4,5-tetrametilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

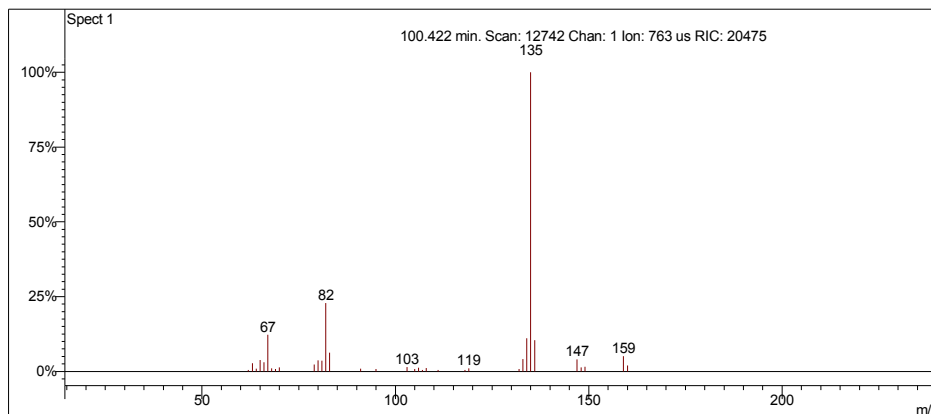
Scan 12045 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 12045, Time: 95.239 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 95.239 min. Scan: 12045 Chan: 1 Ion: 3240 us RIC: 145715 BC
Pair Count: 99 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

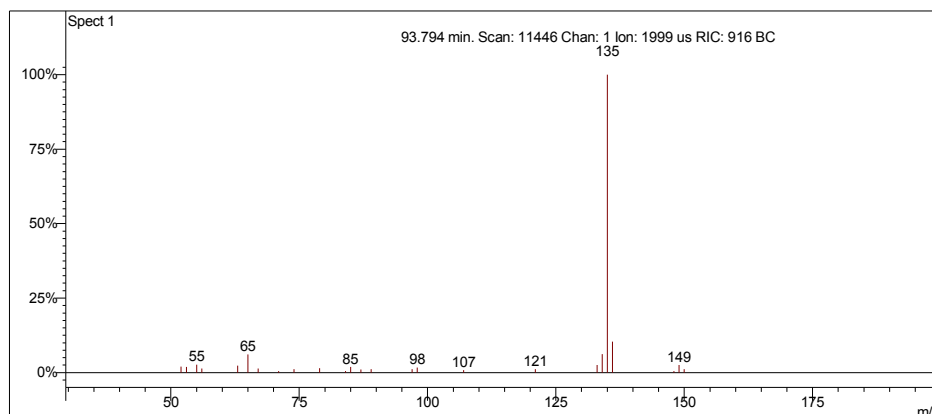
Scan 12742 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 12742, Time: 100.422 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 100.422 min. Scan: 12742 Chan: 1 Ion: 763 us RIC: 20475
Pair Count: 35 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 11446 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 11446, Time: 93.794 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 93.794 min. Scan: 11446 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 916 BC
 Pair Count: 25 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
134	$[M]^{+} = C_{10}H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
119	$[M]^{+} = C_9H_{11}^{+}$	Perda de metila.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.

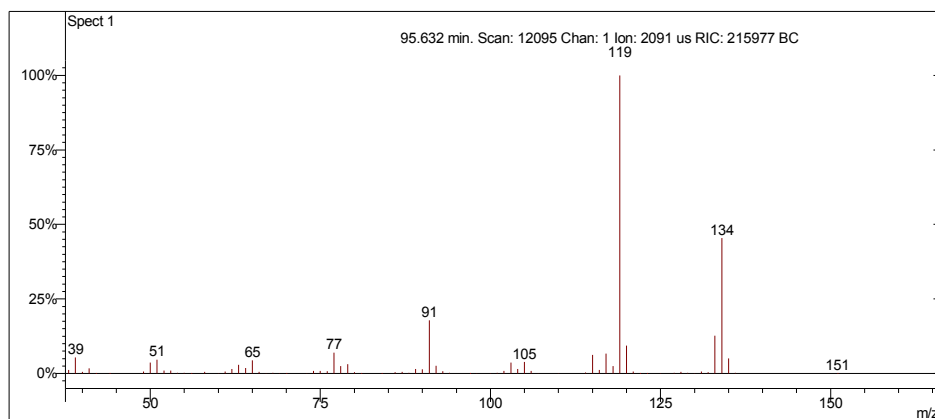
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

1,2,3,5-tetrametilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

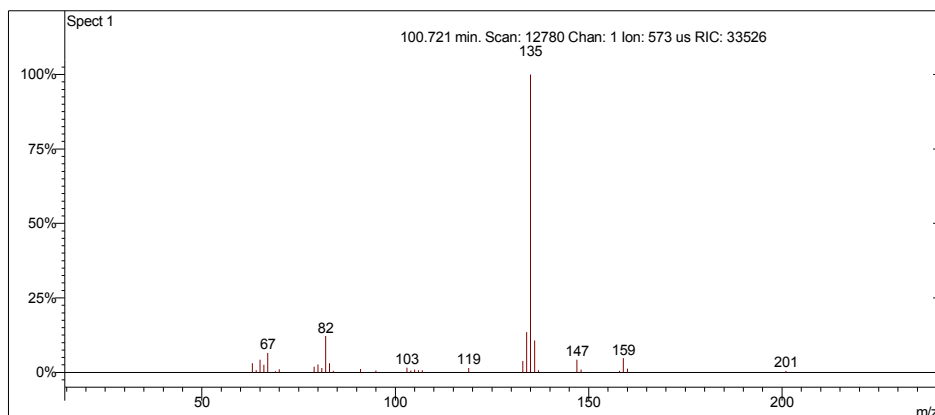
Scan 12095 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 12095, Time: 95.632 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 95.632 min. Scan: 12095 Chan: 1 Ion: 2091 us RIC: 215977 BC
Pair Count: 80 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

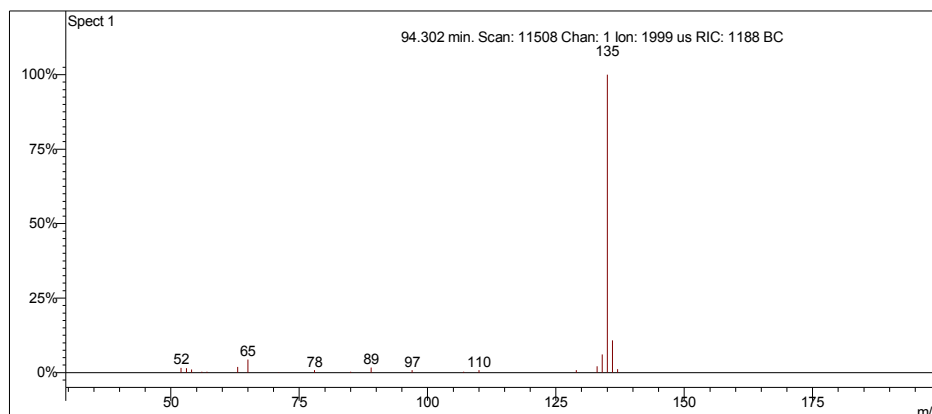
Scan 12780 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 12780, Time: 100.721 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 100.721 min. Scan: 12780 Chan: 1 Ion: 573 us RIC: 33526
Pair Count: 32 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 11508 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 11508, Time: 94.302 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 94.302 min. Scan: 11508 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1188 BC
Pair Count: 20 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
134	$[M]^{+} = C_{10}H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
119	$[M]^{+} = C_9H_{11}^{+}$	Perda de metila.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.

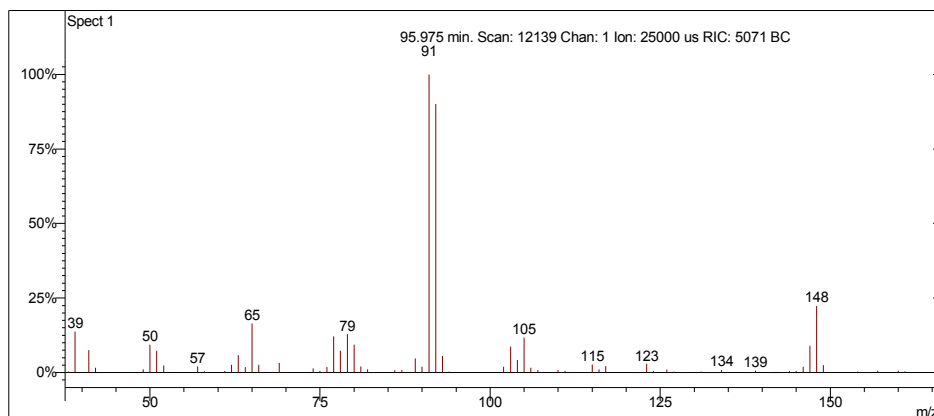
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

3-metilbutilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

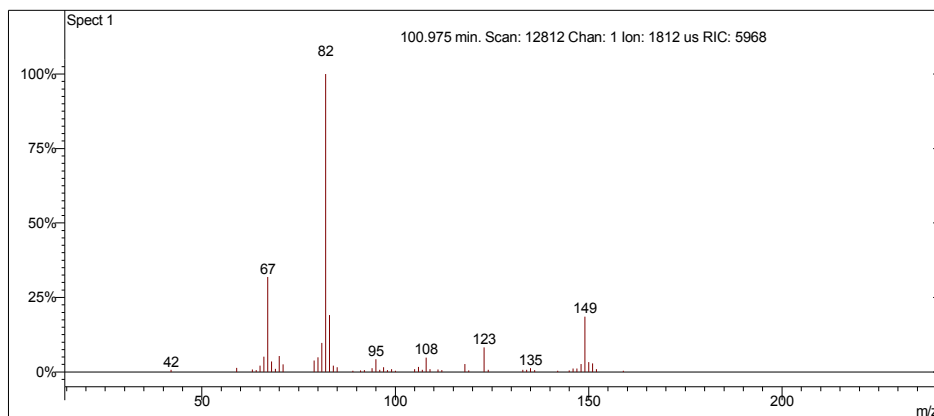
Scan 12139 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 12139, Time: 95.975 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 95.975 min. Scan: 12139 Chan: 1 Ion: 25000 us RIC: 5071 BC
Pair Count: 90 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 12812 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 12812, Time: 100.975 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 100.975 min. Scan: 12812 Chan: 1 Ion: 1812 us RIC: 5968
Pair Count: 53 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
148	$[M]^{+} = C_{11}H_{16}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
92	$C_7H_8^{+}$	Rearranjo de hidrogênio. Para que este rearranjo ocorra, a substituição alquílica deve ser longa e o aromático deve ser mono substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.

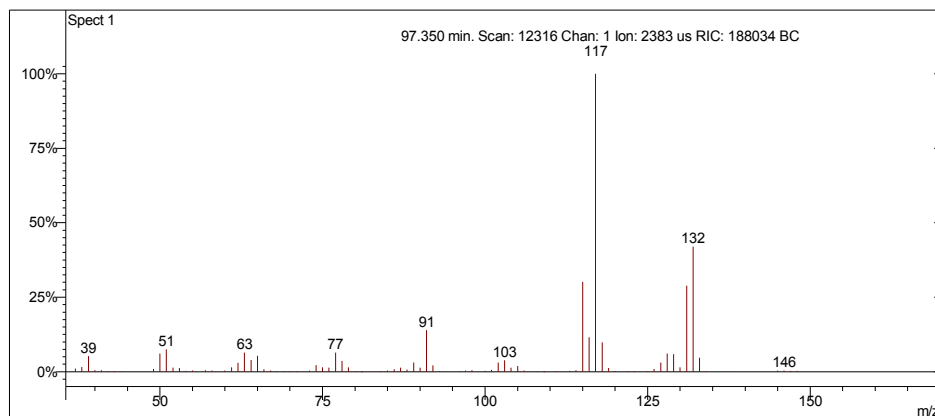
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 149$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_{11}H_{16} = C_{11}H_{17}^{+} + CH_3CN$		
Semmsinal		Metanol
Quantidade desprezível.		

Desconhecido 59

Amostra de Gasolina Comum

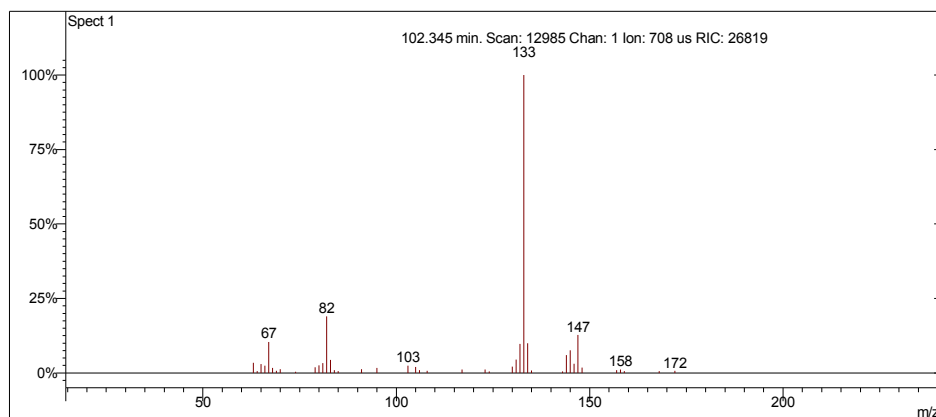
Scan 12316 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 12316, Time: 97.350 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 97.350 min. Scan: 12316 Chan: 1 Ion: 2383 us RIC: 188034 BC
Pair Count: 94 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

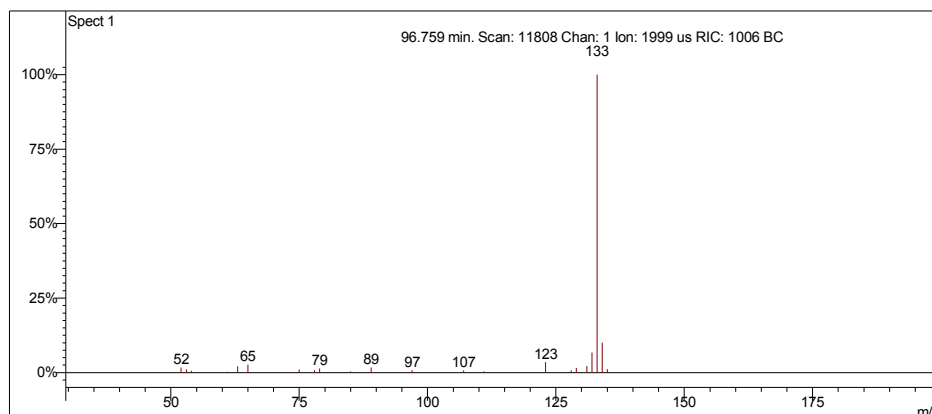
Scan 12985 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 12985, Time: 102.345 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 102.345 min. Scan: 12985 Chan: 1 Ion: 708 us RIC: 26819
Pair Count: 43 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 11808 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 11808, Time: 96.759 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 96.759 min. Scan: 11808 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1006 BC
Pair Count: 25 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
132	$[M]^{++} = C_{10}H_{12}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
117	$[M]^{++} = C_9H_9^+$	Perda de metila.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 10 carbonos.		

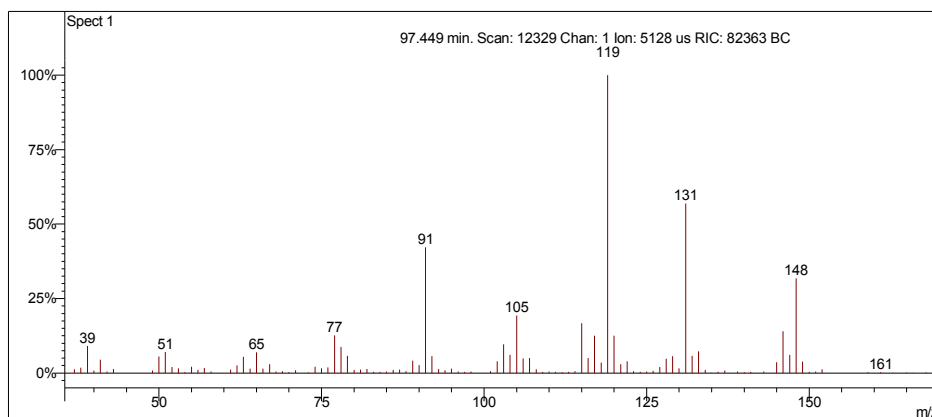
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 133$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{12} = \text{C}_{10}\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 133$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{12} = \text{C}_{10}\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 60

Amostra de Gasolina Comum

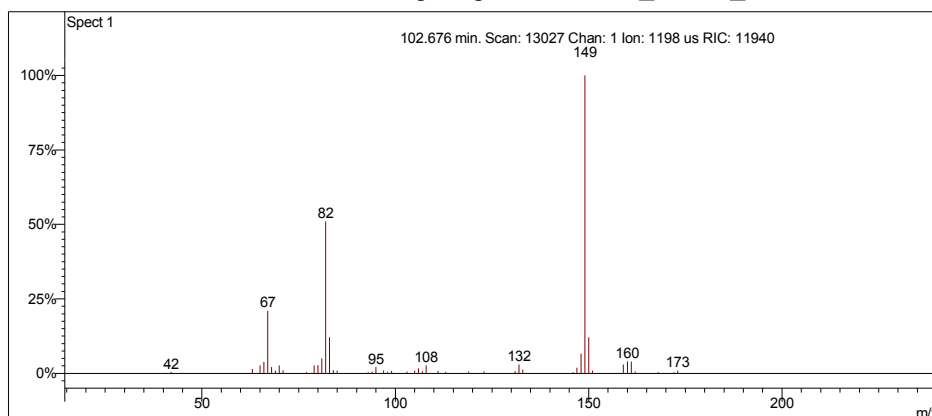
Scan 12329 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 12329, Time: 97.449 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 97.449 min. Scan: 12329 Chan: 1 Ion: 5128 us RIC: 82363 BC
Pair Count: 114 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

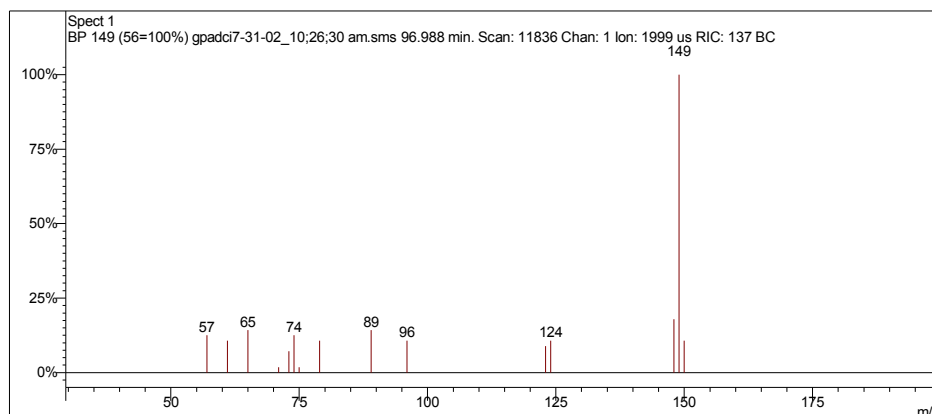
Scan 13027 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 13027, Time: 102.676 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 102.676 min. Scan: 13027 Chan: 1 Ion: 1198 us RIC: 11940
Pair Count: 48 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 11836 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 11836, Time: 96.988 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 96.988 min. Scan: 11836 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 137 BC
Pair Count: 15 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
148	$[M]^{+*} = C_{11}H_{16}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
131	$[M-15]^{+} = C_{10}H_{13}^{+}$	Perda de metila (outro aromático).
119	$C_9H_{11}^{+}$	Perda de etila.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.
<p>Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 11 carbonos. Coelui com outro aromático.</p>		

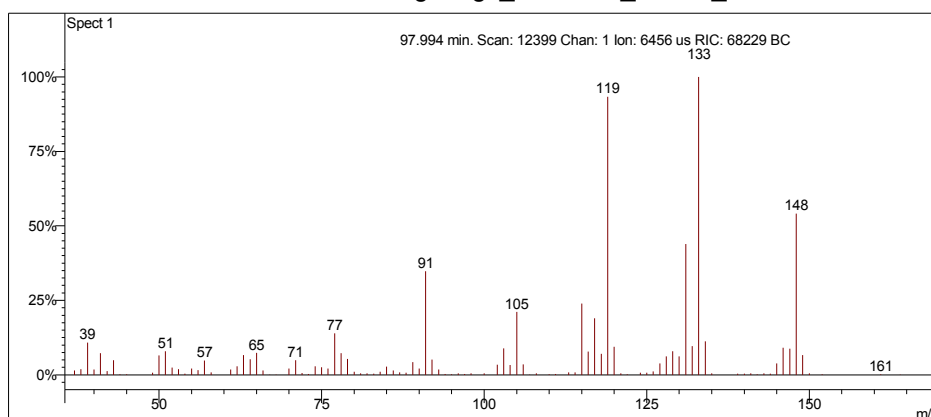
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 149$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{16} = \text{C}_{11}\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 149$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{16} = \text{C}_{11}\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 61

Amostra de Gasolina Comum

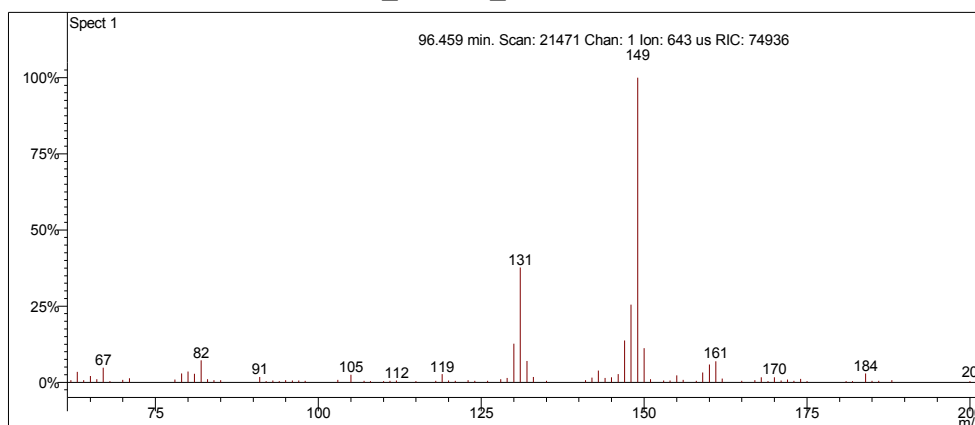
Scan 12399 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 12399, Time: 97.994 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 97.994 min. Scan: 12399 Chan: 1 Ion: 6456 us RIC: 68229 BC
Pair Count: 111 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

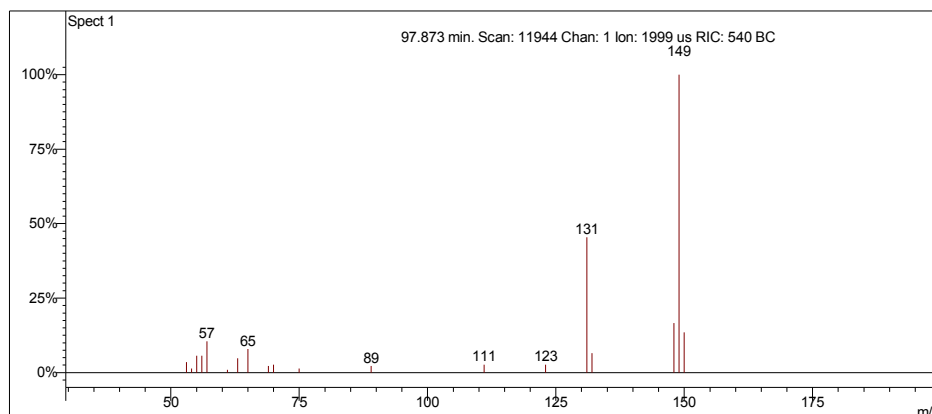
Scan 21471 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 21471, Time: 96.459 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 96.459 min. Scan: 21471 Chan: 1 Ion: 643 us RIC: 74936
Pair Count: 85 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 11944 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 11944, Time: 97.873 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 97.873 min. Scan: 11944 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 540 BC
Pair Count: 19 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
148	$[M]^{+} = C_{11}H_{16}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
133	$[M-15]^{+} = C_{10}H_{13}^{+}$	Perda de metila.
119	$C_9H_{11}^{+}$	Perda de etila.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 11 carbonos.		

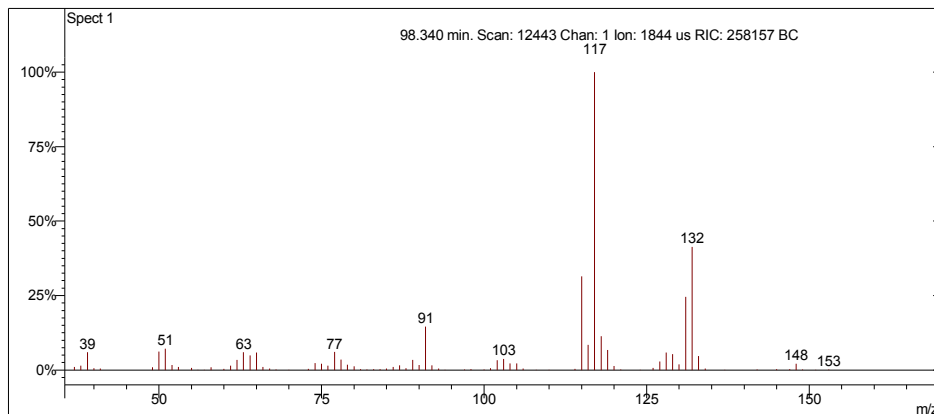
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 149$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{16} = \text{C}_{11}\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 149$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{16} = \text{C}_{11}\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 62

Amostra de Gasolina Comum

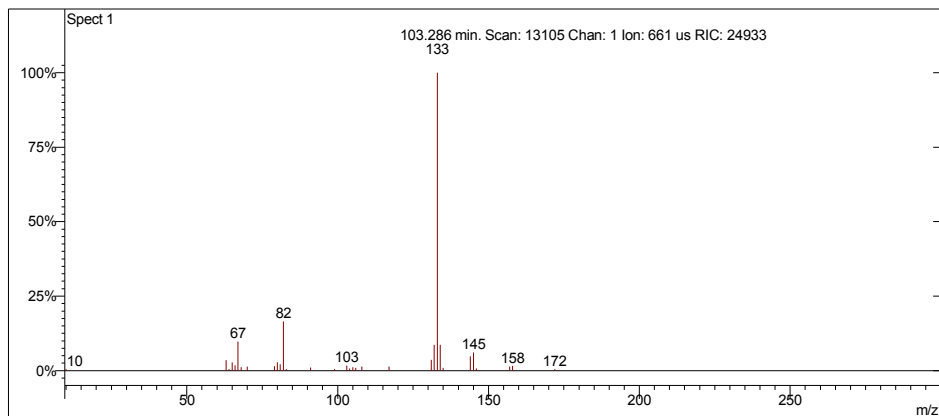
Scan 12443 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 12443, Time: 98.340 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 98.340 min. Scan: 12443 Chan: 1 Ion: 1844 us RIC: 258157 BC
Pair Count: 87 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

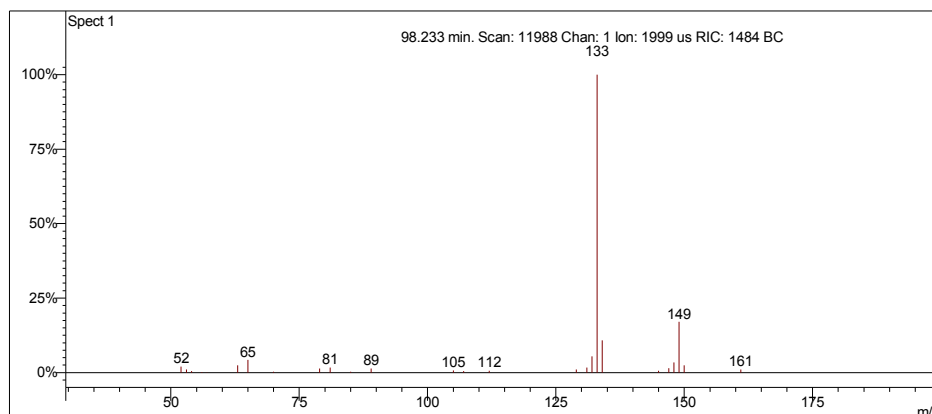
Scan 13105 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciact_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciact_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 13105, Time: 103.286 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 103.286 min. Scan: 13105 Chan: 1 Ion: 661 us RIC: 24933
Pair Count: 32 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 11988 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 11988, Time: 98.233 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 98.233 min. Scan: 11988 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 1484 BC
Pair Count: 26 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
132	$[M]^+ = C_{10}H_{12}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
117	$[M]^+ = C_9H_{11}^+$	Perda de metila.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 10 carbonos.		

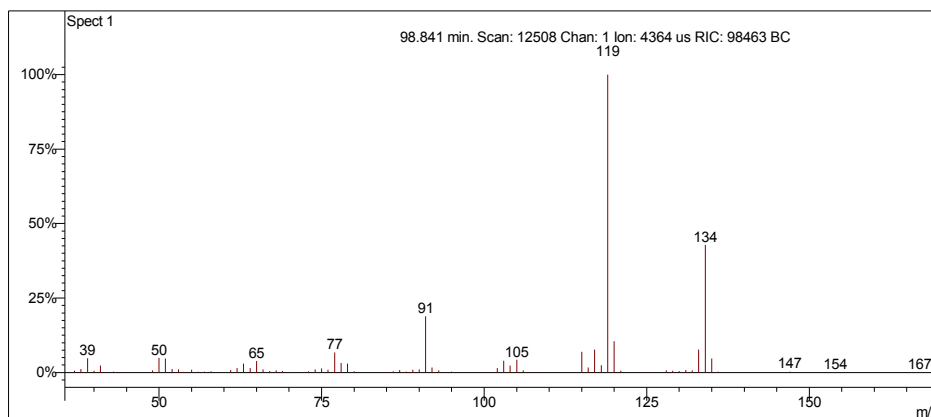
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 133$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{12} = \text{C}_{10}\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 133$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{12} = \text{C}_{10}\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 63

Amostra de Gasolina Comum

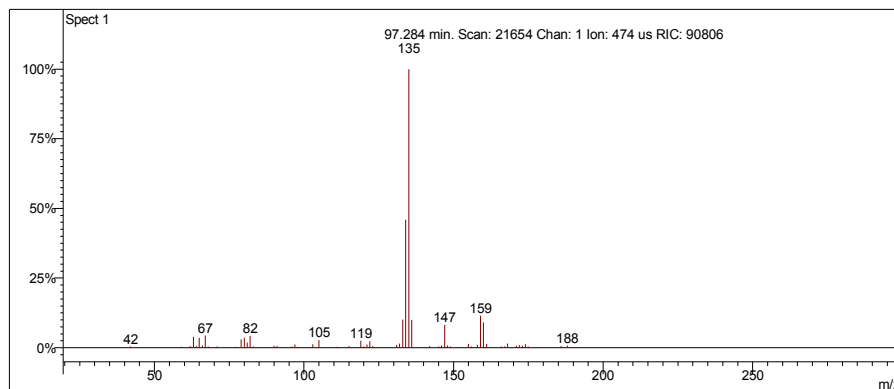
Scan 12508 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 12508, Time: 98.841 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 98.841 min. Scan: 12508 Chan: 1 Ion: 4364 us RIC: 98463 BC
Pair Count: 103 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

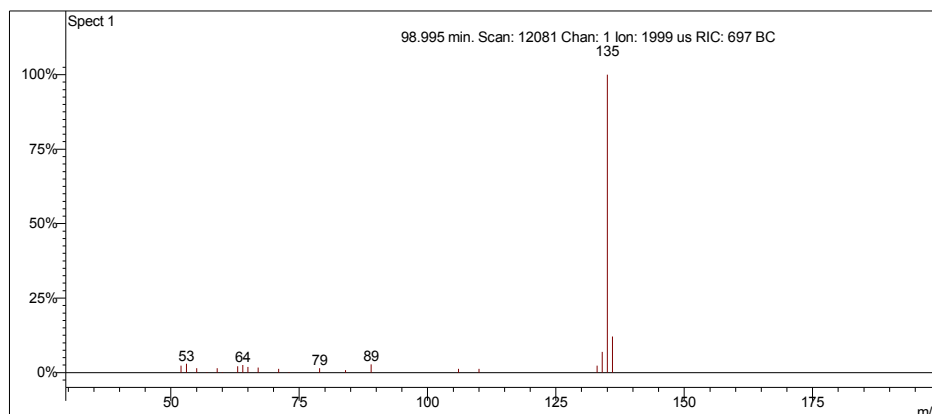
Scan 21654 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 21654, Time: 97.284 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 97.284 min. Scan: 21654 Chan: 1 Ion: 474 us RIC: 90806
Pair Count: 58 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 12081 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 12081, Time: 98.995 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 98.995 min. Scan: 12081 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 697 BC
Pair Count: 21 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
134	$[M]^{+} = C_{10}H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
119	$[M]^{+} = C_9H_{11}^{+}$	Perda de metila.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 10 carbonos.		

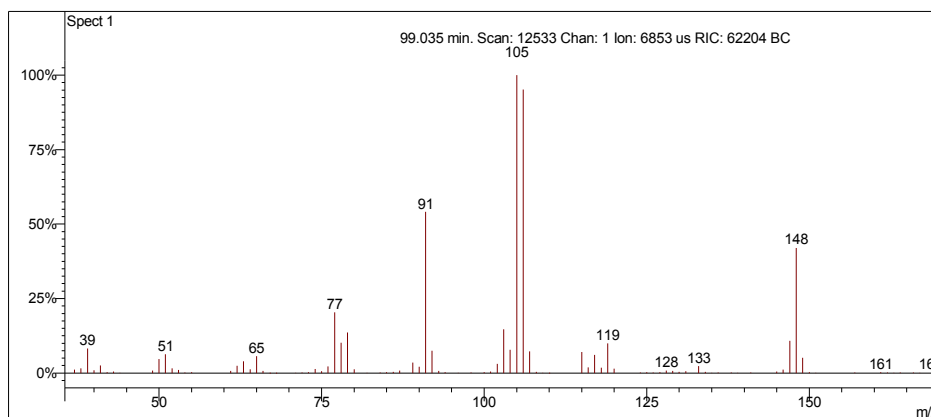
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 135$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{14} = \text{C}_{10}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 64

Amostra de Gasolina Comum

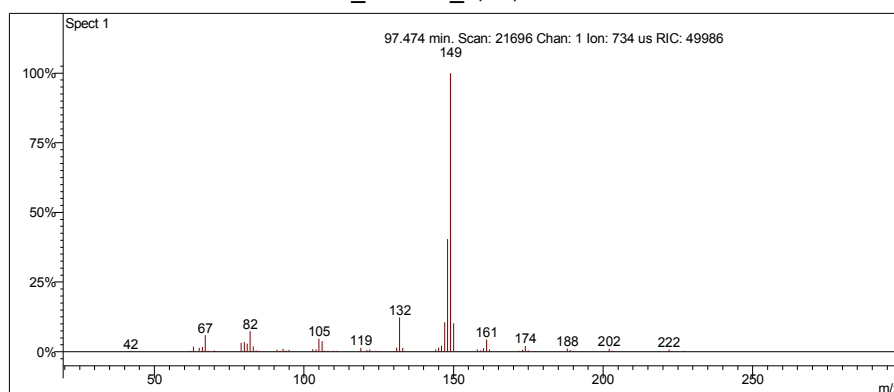
Scan 12533 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 12533, Time: 99.035 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 99.035 min. Scan: 12533 Chan: 1 Ion: 6853 us RIC: 62204 BC
Pair Count: 107 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

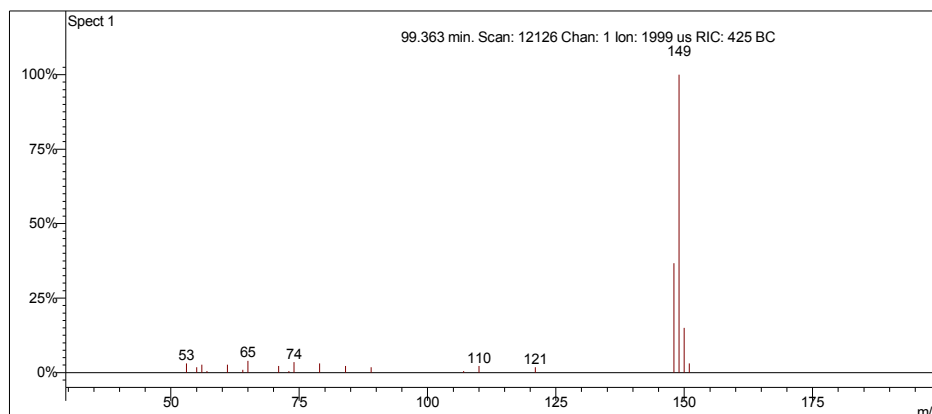
Scan 21696 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 21696, Time: 97.474 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 97.474 min. Scan: 21696 Chan: 1 Ion: 734 us RIC: 49986
Pair Count: 64 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 12126 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 12126, Time: 99.363 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 99.363 min. Scan: 12126 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 425 BC
Pair Count: 20 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
148	$[M]^+ = C_{11}H_{16}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
133	$[M-15]^+ = C_{10}H_{13}^+$	Perda de metila.
119	$C_9H_{11}^+$	Perda de etila.
105	$C_8H_{10}^+$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 11 carbonos.		

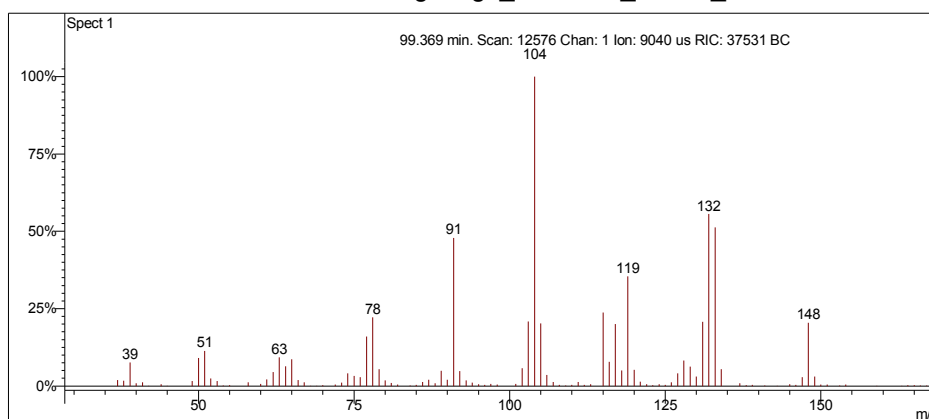
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 149$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{16} = \text{C}_{11}\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 149$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{16} = \text{C}_{11}\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

1,2,3,4-tetraidronaftaleno

Amostra de Gasolina Comum

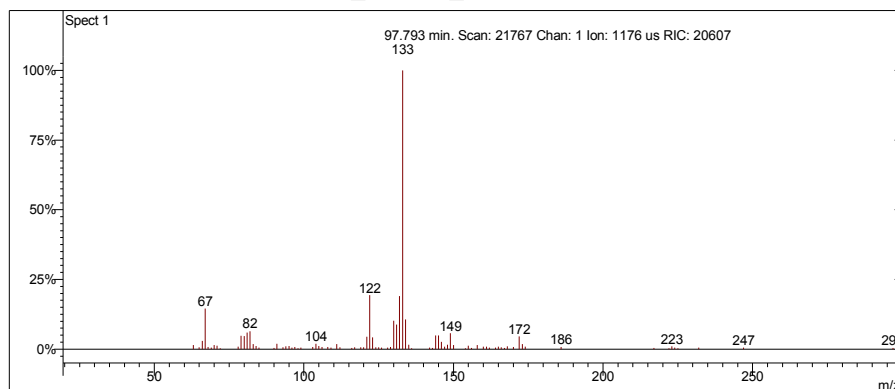
Scan 12576 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 12576, Time: 99.369 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 99.369 min. Scan: 12576 Chan: 1 Ion: 9040 us RIC: 37531 BC
Pair Count: 119 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

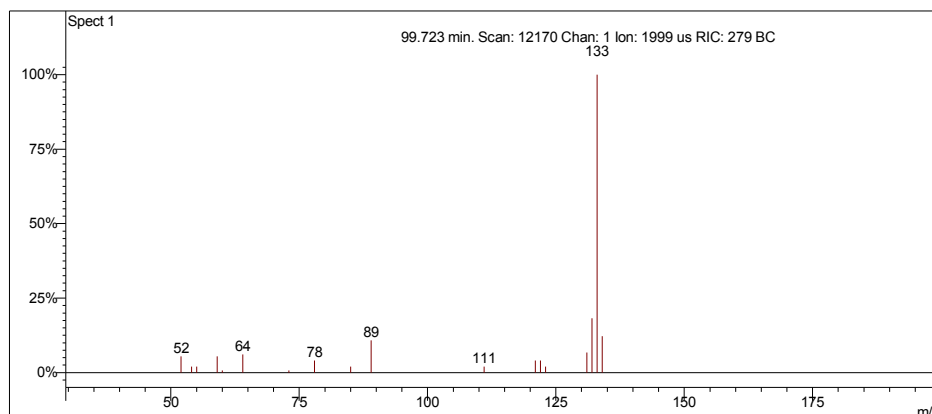
Scan 21767 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 21767, Time: 97.793 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 97.793 min. Scan: 21767 Chan: 1 Ion: 1176 us RIC: 20607
Pair Count: 87 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 12170 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 12170, Time: 99.723 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 99.723 min. Scan: 12170 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 279 BC
Pair Count: 18 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
132	$[M]^{+*} = C_{10}H_{12}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
117	$[M - 15]^{+} = C_9H_{11}^{+}$	Perda de metila.
104	$C_8H_8^{+}$	Íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Observação: substância colelui com outro aromático ramificado com 11 carbonos.		

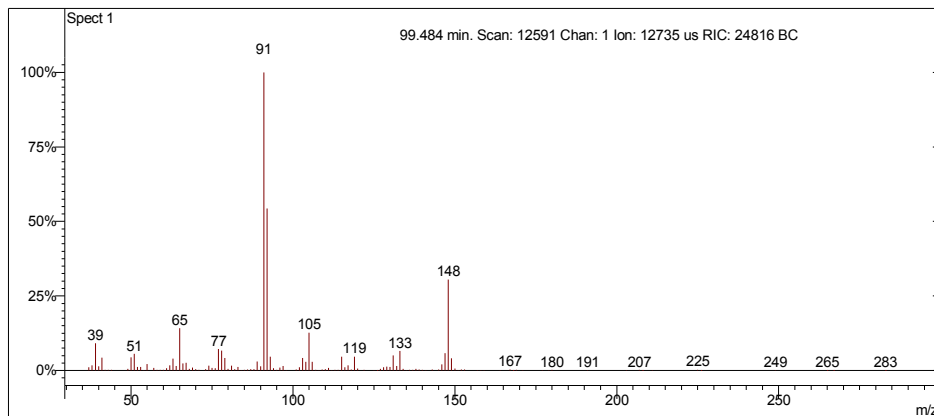
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 133$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{12} = \text{C}_{10}\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 133$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{10}\text{H}_{12} = \text{C}_{10}\text{H}_{13}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Pentilbenzeno

Amostra de Gasolina Comum

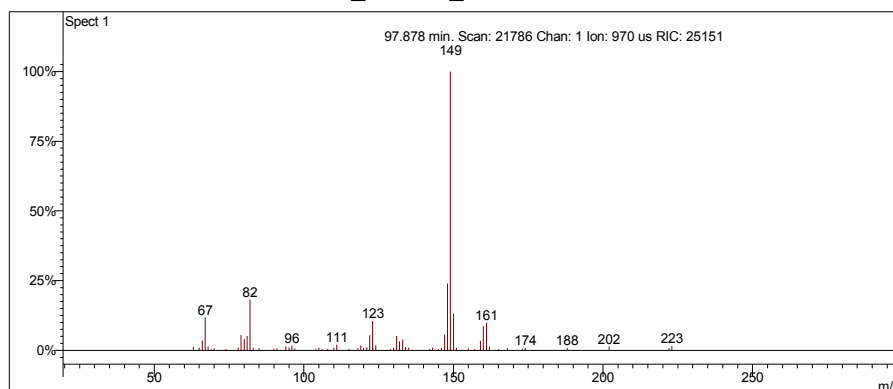
Scan 12591 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 12591, Time: 99.484 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 99.484 min. Scan: 12591 Chan: 1 Ion: 12735 us RIC: 24816 BC
Pair Count: 126 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

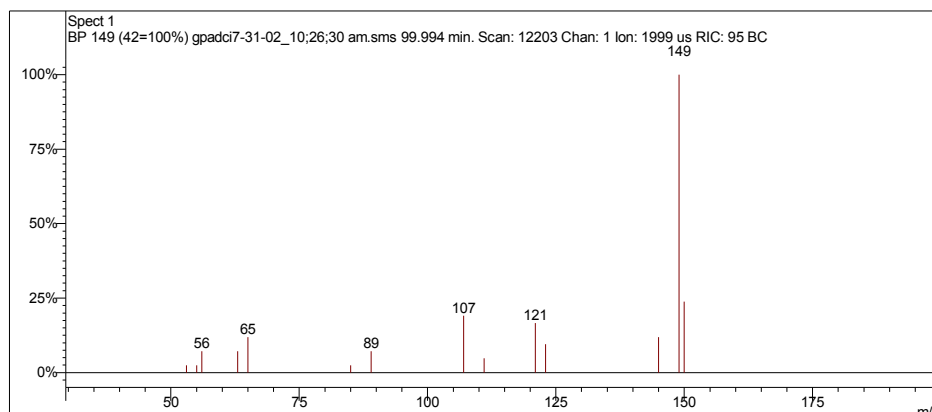
Scan 21786 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 21786, Time: 97.878 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 97.878 min. Scan: 21786 Chan: 1 Ion: 970 us RIC: 25151
Pair Count: 65 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 12203 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 12203, Time: 99.994 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 99.994 min. Scan: 12203 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 95 BC
Pair Count: 14 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
148	$[M]^{++} = C_{11}H_{16}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
119	$C_9H_{11}^+$	Perda de metila.
105	$C_8H_{10}^+$	Formação do íon tropílio substituído.
92	$C_7H_8^+$	Rearranjo de hidrogênio. Para que este rearranjo ocorra, a substituição alquílica deve ser longa e o aromático deve ser mono substituído.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.

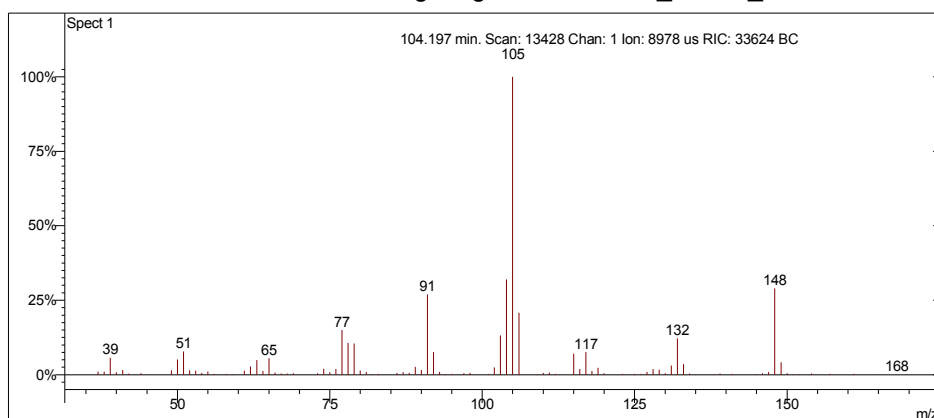
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 149$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{16} = \text{C}_{11}\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 149$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{16} = \text{C}_{11}\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 65

Amostra de Gasolina Comum

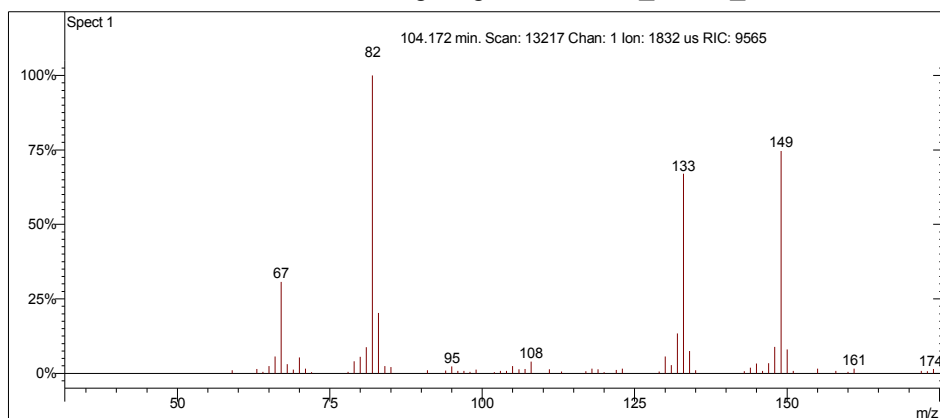
Scan 13428 from c:\... \amostras\cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinacomum_9-4-06_11;22;29 am.sms
Scan No: 13428, Time: 104.197 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 104.197 min. Scan: 13428 Chan: 1 Ion: 8978 us RIC: 33624 BC
Pair Count: 110 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

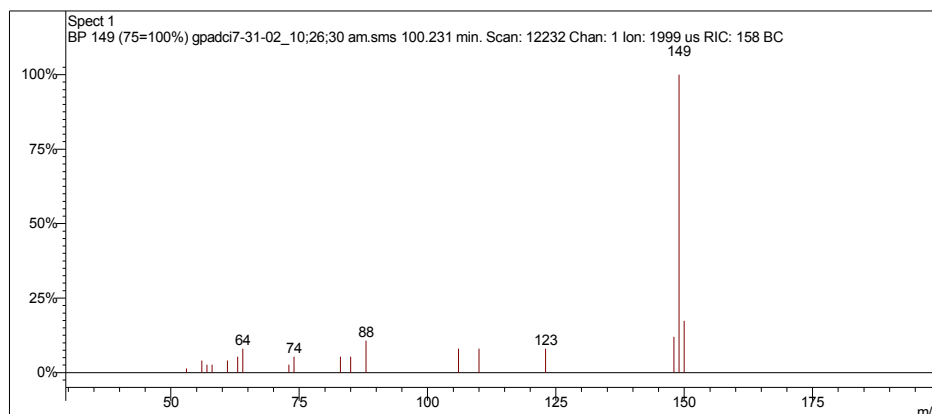
Scan 13217 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 13217, Time: 104.172 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 104.172 min. Scan: 13217 Chan: 1 Ion: 1832 us RIC: 9565
Pair Count: 65 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 12232 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 12232, Time: 100.231 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 100.231 min. Scan: 12232 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 158 BC
Pair Count: 18 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
148	$[M]^{+} = C_{11}H_{16}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
133	$[M-15]^{+} = C_{10}H_{13}^{+}$	Perda de metila.
119	$C_9H_{11}^{+}$	Perda de etila.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 11 carbonos.		

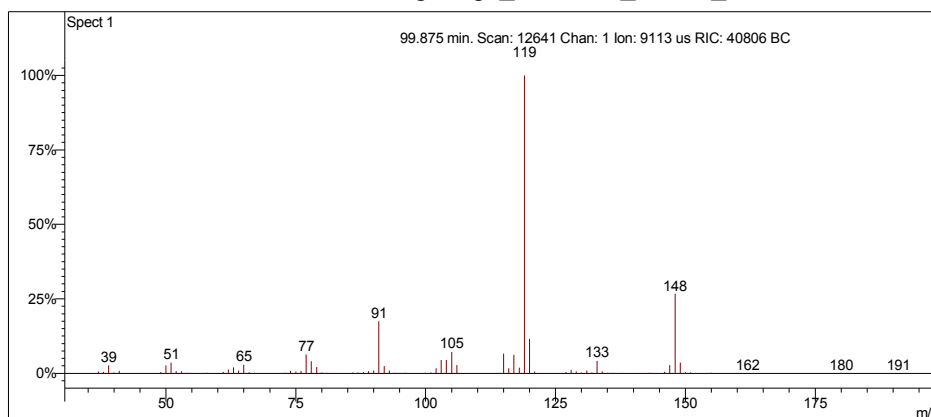
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 149$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^+ + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{16} = \text{C}_{11}\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 149$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^+ + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{16} = \text{C}_{11}\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 66

Amostra de Gasolina Comum

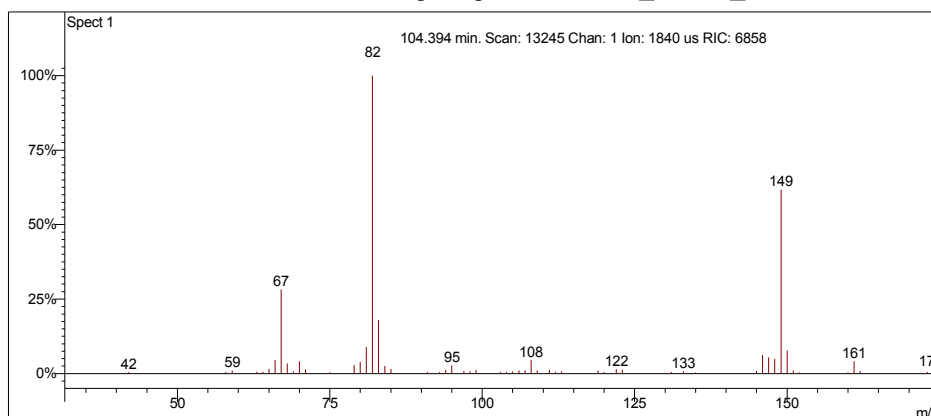
Scan 12641 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 12641, Time: 99.875 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 99.875 min. Scan: 12641 Chan: 1 Ion: 9113 us RIC: 40806 BC
Pair Count: 100 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

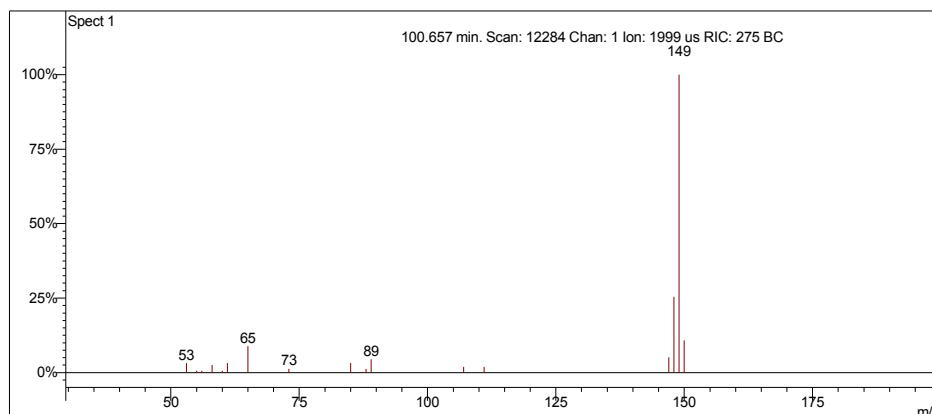
Scan 13245 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 13245, Time: 104.394 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 104.394 min. Scan: 13245 Chan: 1 Ion: 1840 us RIC: 6858
Pair Count: 59 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 12284 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 12284, Time: 100.657 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 100.657 min. Scan: 12284 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 275 BC
Pair Count: 17 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
148	$[M]^{+•} = C_{11}H_{16}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
133	$[M-15]^{+} = C_{10}H_{13}^{+}$	Perda de metila.
119	$C_9H_{11}^{+}$	Perda de etila.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 11 carbonos.		

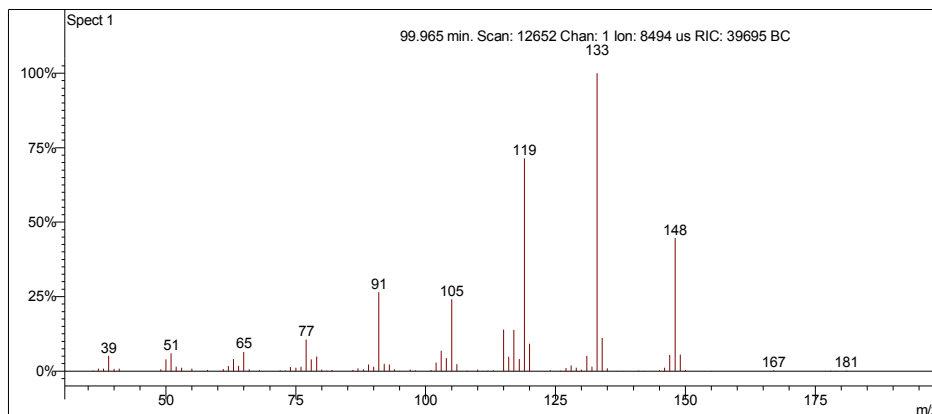
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 149$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^+ + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{16} = \text{C}_{11}\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 149$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^+ + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{16} = \text{C}_{11}\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 67

Amostra de Gasolina Comum

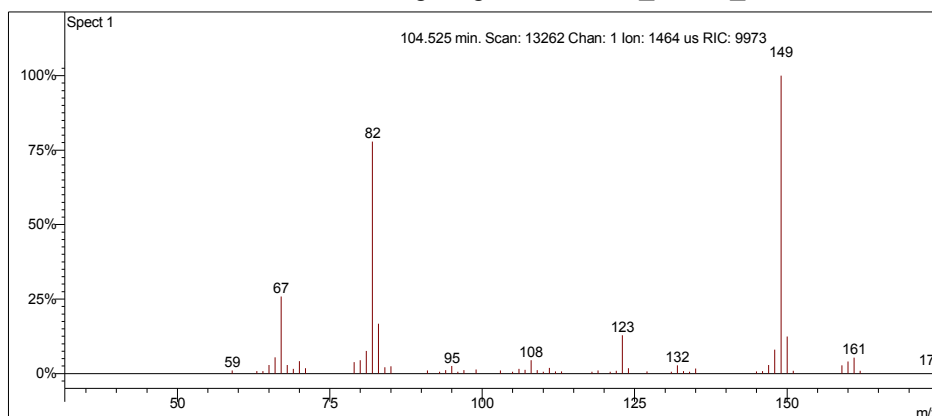
Scan 12652 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 12652, Time: 99.965 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 99.965 min. Scan: 12652 Chan: 1 Ion: 8494 us RIC: 39695 BC
Pair Count: 94 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

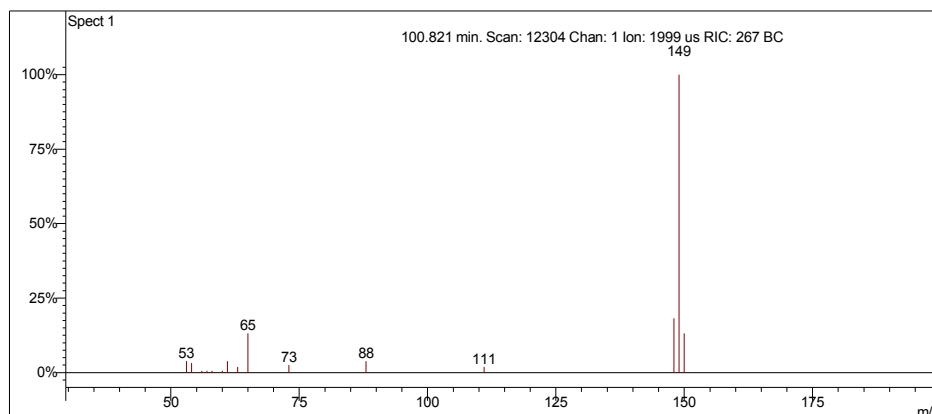
Scan 13262 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 13262, Time: 104.525 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 104.525 min. Scan: 13262 Chan: 1 Ion: 1464 us RIC: 9973
Pair Count: 58 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 12304 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 12304, Time: 100.821 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 100.821 min. Scan: 12304 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 267 BC
 Pair Count: 15 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
148	$[M]^{+} = C_{11}H_{16}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
133	$[M-15]^{+} = C_{10}H_{13}^{+}$	Perda de metila.
119	$C_9H_{11}^{+}$	Perda de etila.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 11 carbonos.		

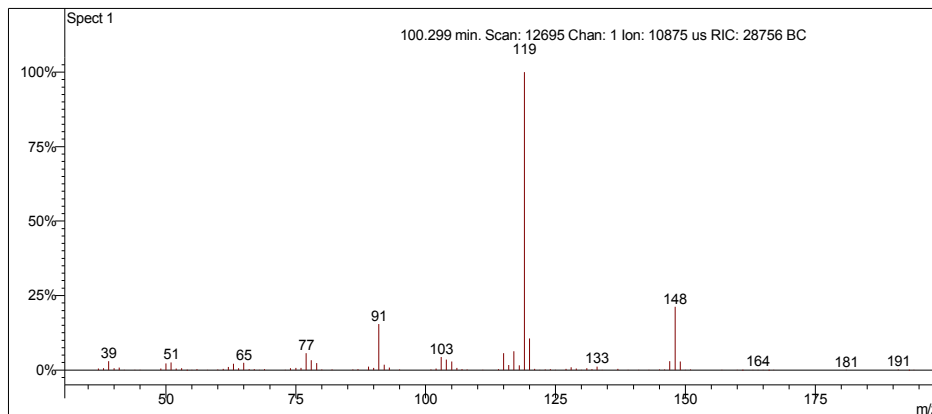
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 149$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^+ + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{16} = \text{C}_{11}\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 149$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^+ + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{16} = \text{C}_{11}\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 66

Amostra de Gasolina Comum

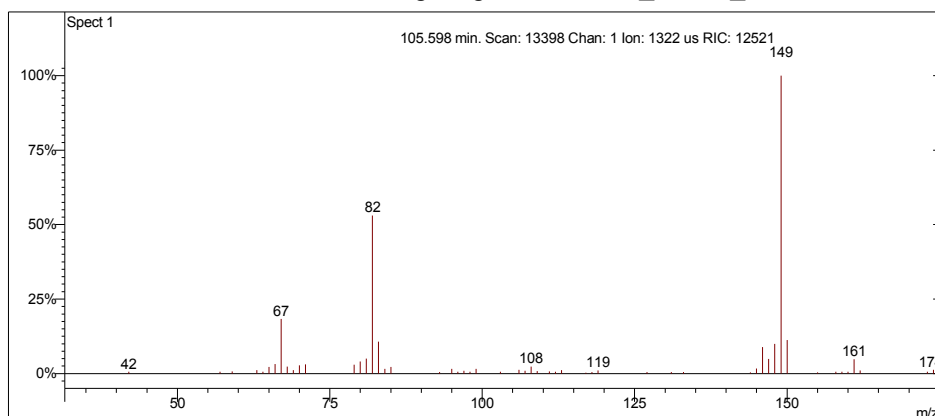
Scan 12695 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 12695, Time: 100.299 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 100.299 min. Scan: 12695 Chan: 1 Ion: 10875 us RIC: 28756 BC
Pair Count: 103 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

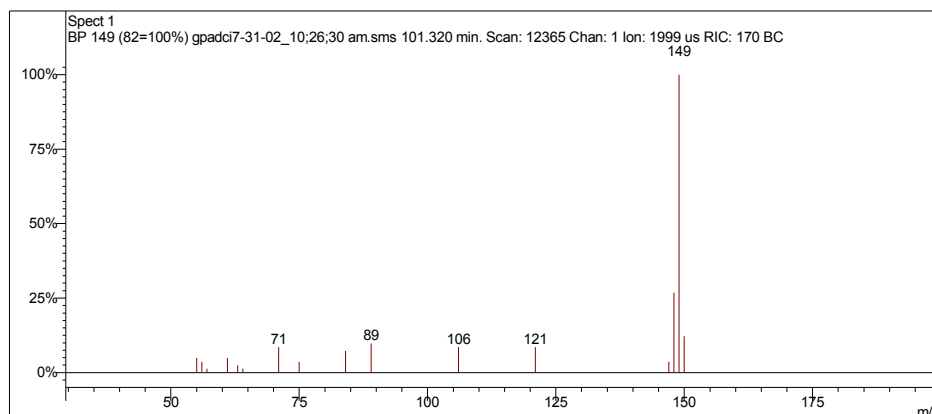
Scan 13398 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 13398, Time: 105.598 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 105.598 min. Scan: 13398 Chan: 1 Ion: 1322 us RIC: 12521
Pair Count: 56 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 12365 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 12365, Time: 101.320 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 101.320 min. Scan: 12365 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 170 BC
Pair Count: 16 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
148	$[M]^{+} = C_{11}H_{16}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
133	$[M-15]^{+} = C_{10}H_{13}^{+}$	Perda de metila.
119	$C_9H_{11}^{+}$	Perda de etila.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 11 carbonos.		

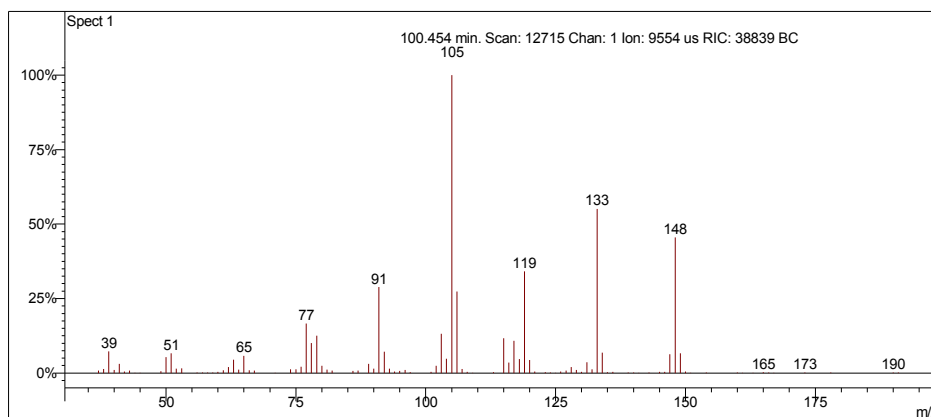
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 149$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^+ + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{16} = \text{C}_{11}\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 149$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^+ + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{16} = \text{C}_{11}\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 69

Amostra de Gasolina Comum

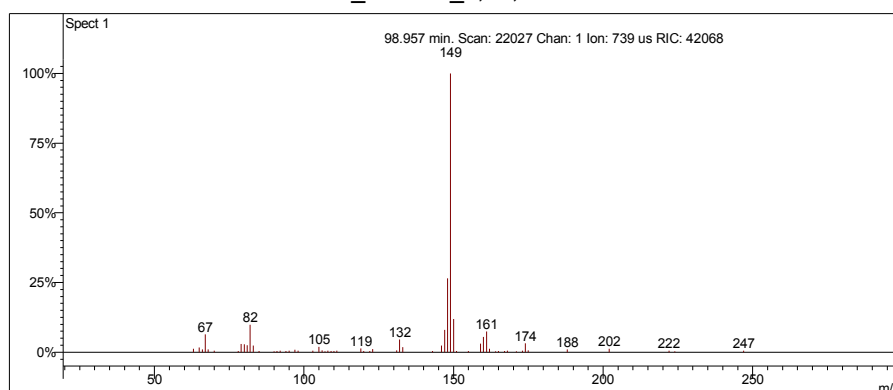
Scan 12715 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 12715, Time: 100.454 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 100.454 min. Scan: 12715 Chan: 1 Ion: 9554 us RIC: 38839 BC
Pair Count: 108 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 22027 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 22027, Time: 98.957 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 98.957 min. Scan: 22027 Chan: 1 Ion: 739 us RIC: 42068
Pair Count: 60 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
148	$[M]^{+•} = C_{11}H_{16}^{+}$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
133	$[M-15]^{+} = C_{10}H_{13}^{+}$	Perda de metila.
119	$C_9H_{11}^{+}$	Perda de etila.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 11 carbonos.		

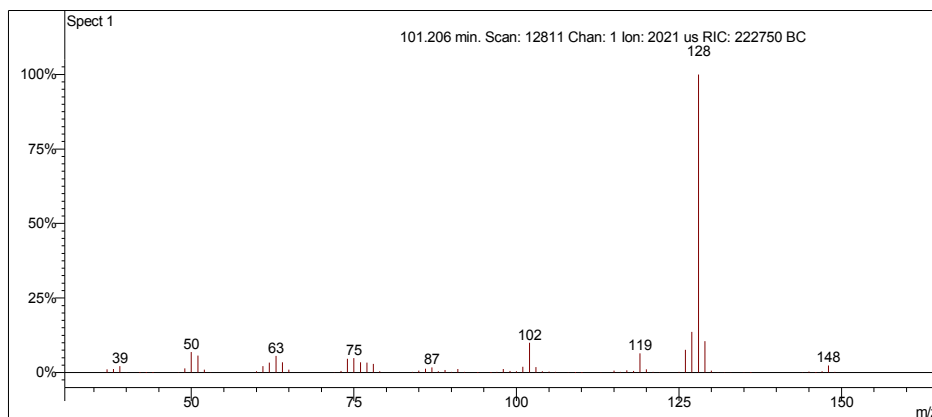
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 149$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+•} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_{11}H_{16} = C_{11}H_{17}^{+} + CH_3CN$		
$[M+1]^{+} = 149$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{+•} + CH_3OH = CH_3OH_2^{+} + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^{+} + C_{11}H_{16} = C_{11}H_{17}^{+} + CH_3OH$		

Naftaleno

Amostra de Gasolina Comum

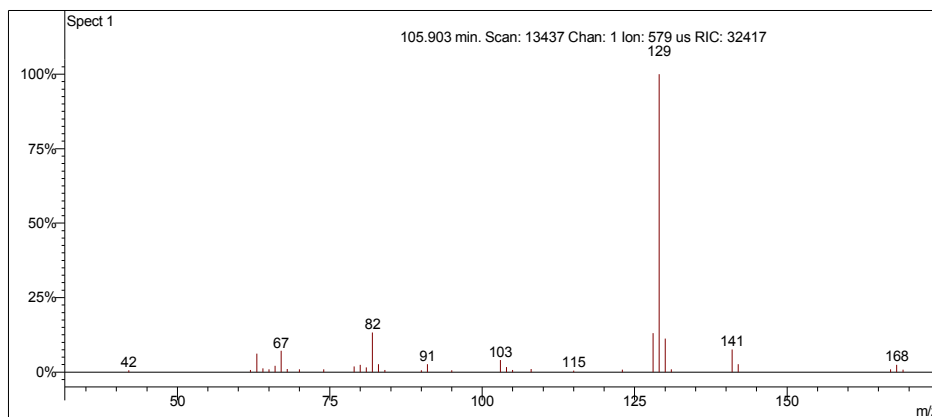
Scan 12811 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 12811, Time: 101.206 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 101.206 min. Scan: 12811 Chan: 1 Ion: 2021 us RIC: 222750 BC
Pair Count: 79 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

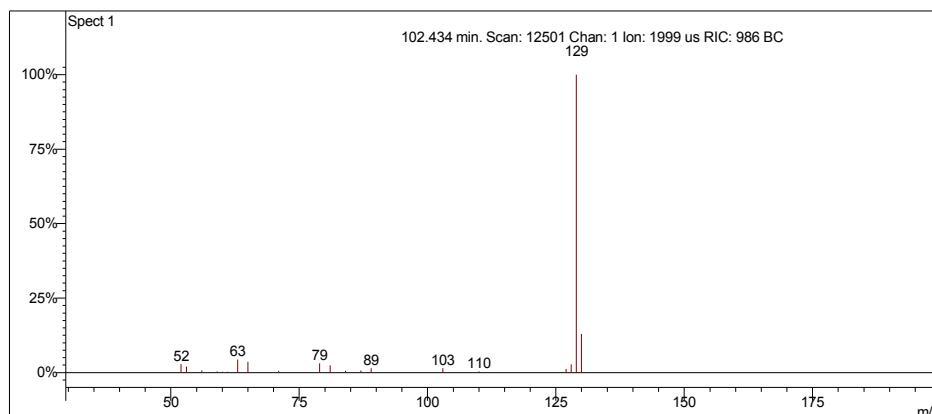
Scan 13437 from c:\... \amostras\cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gasolinaciacet_9-6-06_10;56;22 am.sms
Scan No: 13437, Time: 105.903 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 105.903 min. Scan: 13437 Chan: 1 Ion: 579 us RIC: 32417
Pair Count: 35 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 10 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 12501 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 12501, Time: 102.434 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 102.434 min. Scan: 12501 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 986 BC
 Pair Count: 21 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
128	$[M-15]^+ = C_{10}H_8^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
102	$C_8H_7^+$	Fragmentação do anel com perda de acetileno.
63	$C_5H_3^+$	

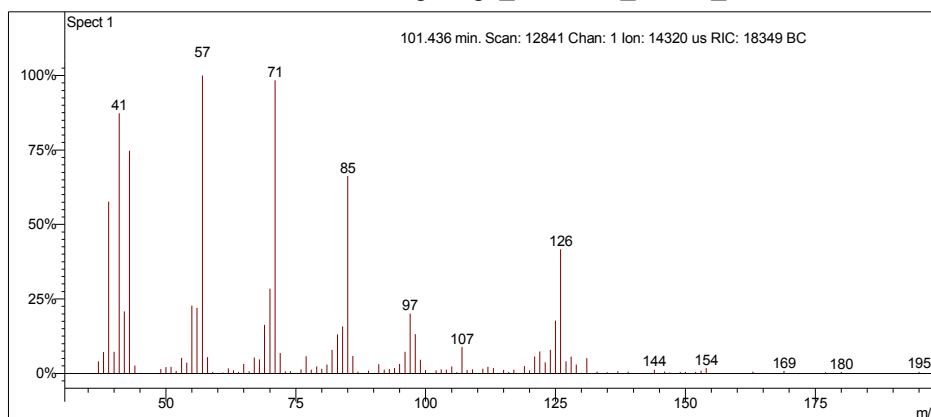
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 129$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+\bullet} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \bullet CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_{10}H_8 = C_{11}H_9^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 129$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{+\bullet} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \bullet CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_{10}H_8 = C_{11}H_9^+ + CH_3OH$		

Desconhecido 70

Amostra de Gasolina Comum

Scan 12841 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 12841, Time: 101.436 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 101.436 min. Scan: 12841 Chan: 1 Ion: 14320 us RIC: 18349 BC
Pair Count: 110 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

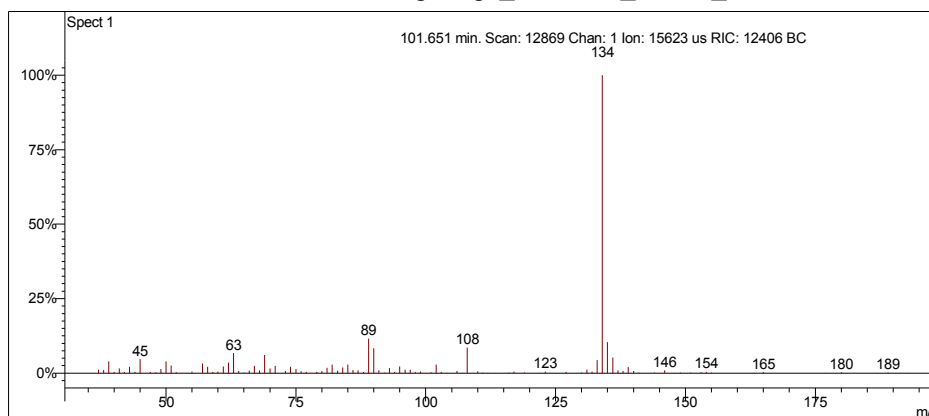
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
156 (ausente)	$[M]^{+•} = C_{11}H_{24}^{+}$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
126	$C_9H_{18}^{+}$	Perda de etano.
97	$C_7H_{13}^{+}$	Perda de butano com rearranjo de hidrogênio.
85	$C_6H_{13}^{+}$	Perda de pentila.
71	$C_5H_{11}^{+}$	Fragmentação alílica.
57	$C_4H_9^{+}$	Fragmentação alílica.
41	$C_3H_5^{+}$	Fragmentação alílica.
Conclusão: a substância é um isoparafínico com 11 carbonos.		

Desconhecido 71

Amostra de Gasolina Comum

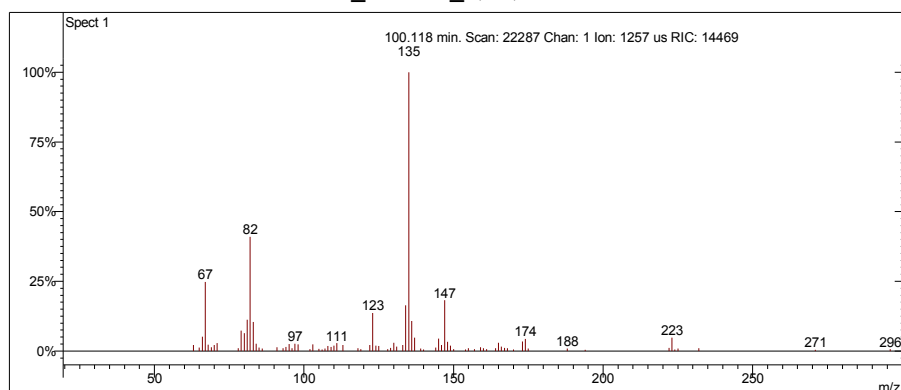
Scan 12869 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 12869, Time: 101.651 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 101.651 min. Scan: 12869 Chan: 1 Ion: 15623 us RIC: 12406 BC
Pair Count: 108 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 22287 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 22287, Time: 100.118 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 100.118 min. Scan: 22287 Chan: 1 Ion: 1257 us RIC: 14469
Pair Count: 82 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
134	$[M]^{+} = C_{10}H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
63	$C_5H_3^{+}$	
Conclusão: a substância é um aromático com 10 carbonos.		

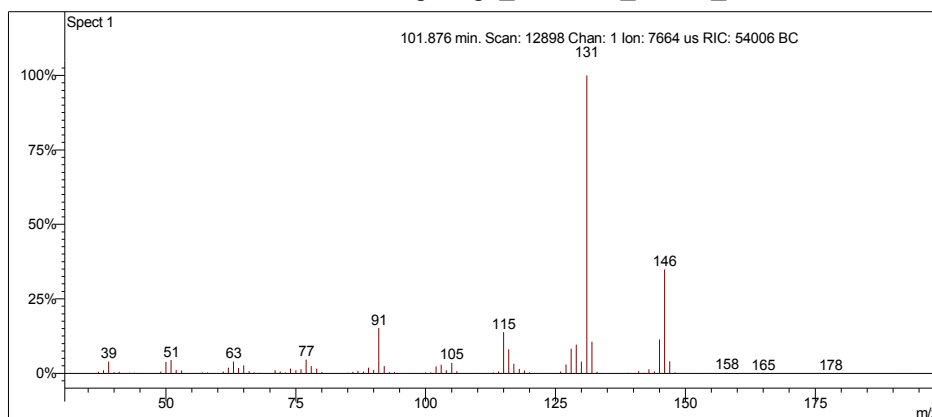
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 135$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_{10}H_{14} = C_{10}H_{15}^{+} + CH_3CN$		
Sem sinal		Metanol

Desconhecido 72

Amostra de Gasolina Comum

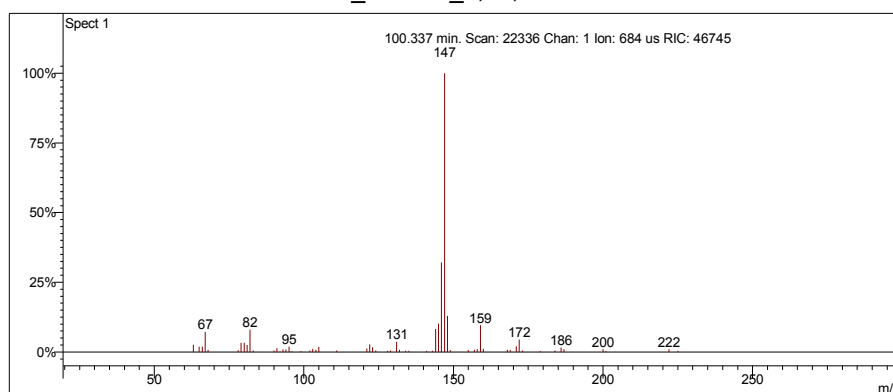
Scan 12898 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 12898, Time: 101.876 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 101.876 min. Scan: 12898 Chan: 1 Ion: 7664 us RIC: 54006 BC
Pair Count: 107 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

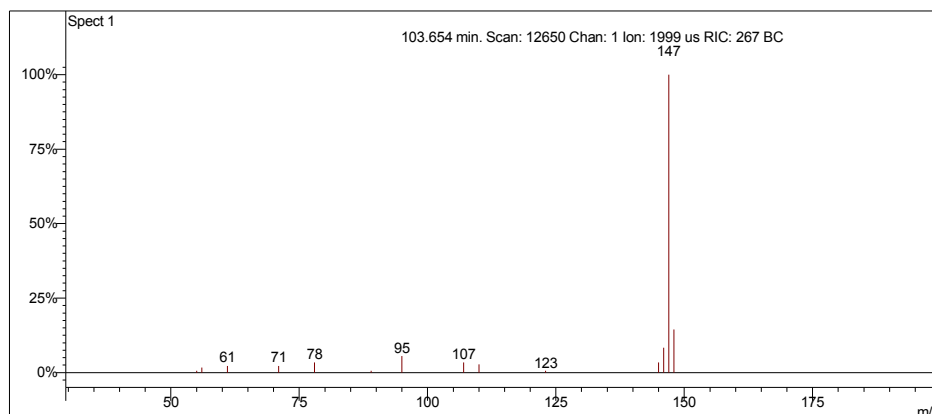
Scan 22336 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 22336, Time: 100.337 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 100.337 min. Scan: 22336 Chan: 1 Ion: 684 us RIC: 46745
Pair Count: 60 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 12650 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 12650, Time: 103.654 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 103.654 min. Scan: 12650 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 267 BC
Pair Count: 14 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
146	$[M]^{+*} = C_{11}H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
131	$[M-15]^{+} = C_{10}H_{11}^{+}$	Perda de metila.
115	$C_9H_7^{+}$	Perda de etila com rearranjo de hidrogênio.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático com 11 carbonos.		

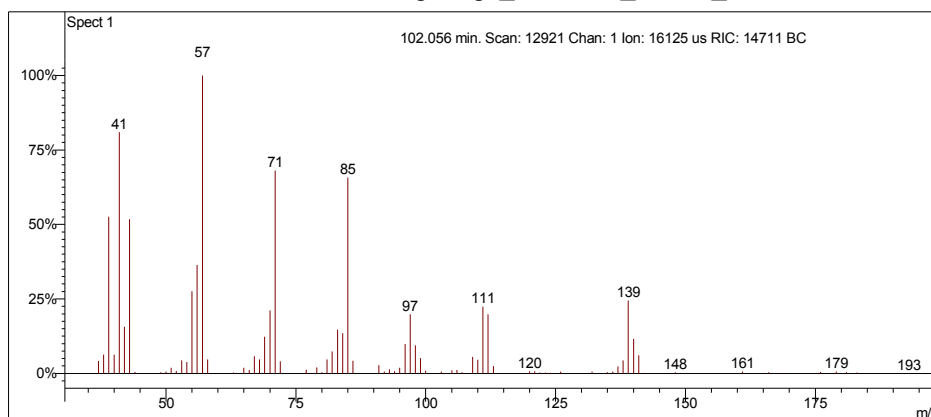
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 147$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{14} = \text{C}_{11}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 147$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{14} = \text{C}_{11}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 73

Amostra de Gasolina Comum

Scan 12921 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 12921, Time: 102.056 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 102.056 min. Scan: 12921 Chan: 1 Ion: 16125 us RIC: 14711 BC
Pair Count: 92 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

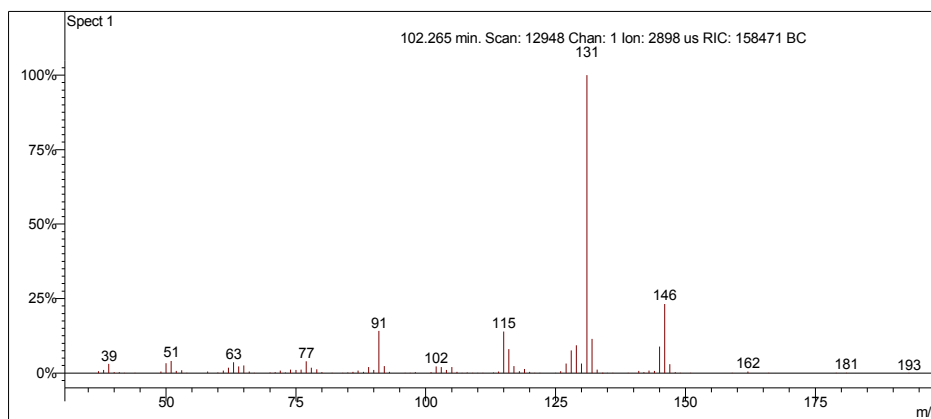
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
154 (ausente)	$[M]^{+} = C_{11}H_{22}^{+}$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
139	$C_{10}H_{19}^{+}$	Perda de metila.
111	$C_8H_{15}^{+}$	Perda de propila.
97	$C_7H_{13}^{+}$	Perda de propila.
85	$C_6H_{13}^{+}$	Fragmentação alílica.
71	$C_5H_{11}^{+}$	Fragmentação alílica.
57	$C_4H_9^{+}$	Fragmentação alílica.
41	$C_3H_5^{+}$	Fragmentação alílica.
Conclusão: a substância é um isoparafínico com 11 carbonos.		

Desconhecido 74

Amostra de Gasolina Comum

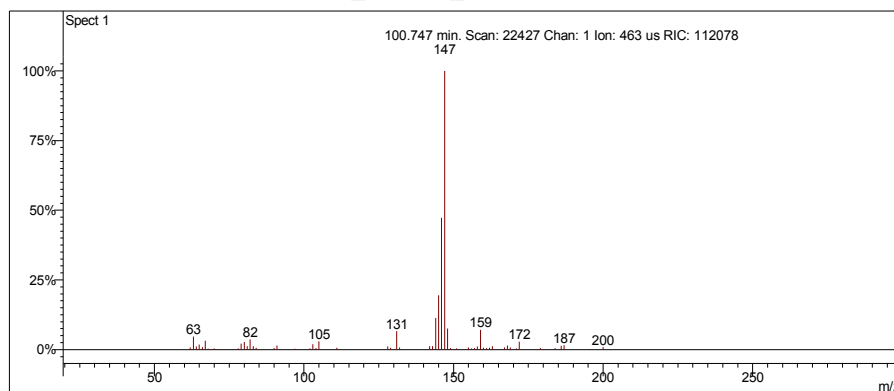
Scan 12948 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 12948, Time: 102.265 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 102.265 min. Scan: 12948 Chan: 1 Ion: 2898 us RIC: 158471 BC
Pair Count: 102 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

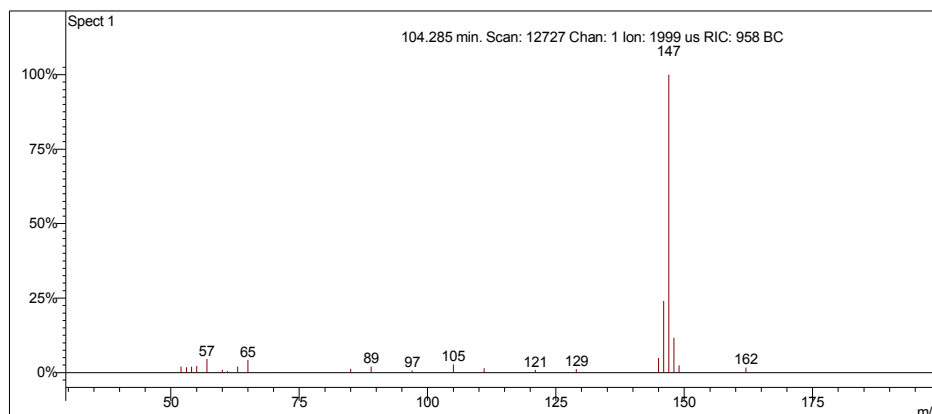
Scan 22427 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 22427, Time: 100.747 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 100.747 min. Scan: 22427 Chan: 1 Ion: 463 us RIC: 112078
Pair Count: 55 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 12727 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 12727, Time: 104.285 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 104.285 min. Scan: 12727 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 958 BC
 Pair Count: 23 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
146	$[M]^+ = C_{11}H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
131	$[M-15]^+ = C_{10}H_{11}^+$	Perda de metila.
115	$C_9H_7^+$	Perda de etila com rearranjos de hidrogênio.
105	$C_8H_{10}^+$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático com 11 carbonos.		

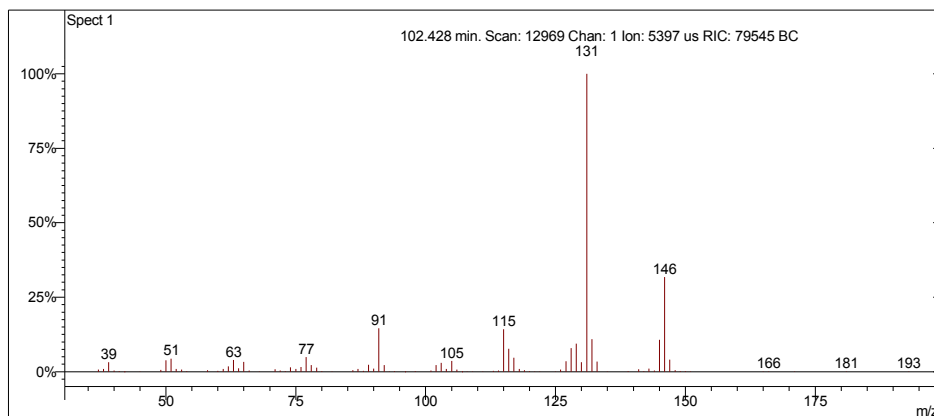
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 147$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{14} = \text{C}_{11}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 147$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{14} = \text{C}_{11}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 75

Amostra de Gasolina Comum

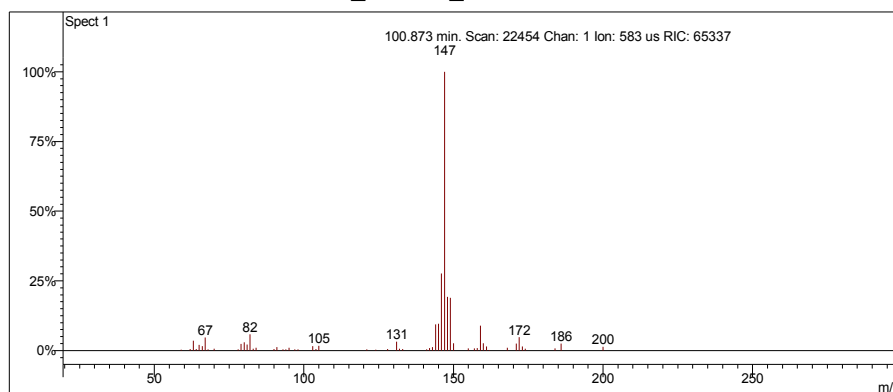
Scan 12969 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 12969, Time: 102.428 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 102.428 min. Scan: 12969 Chan: 1 Ion: 5397 us RIC: 79545 BC
Pair Count: 99 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

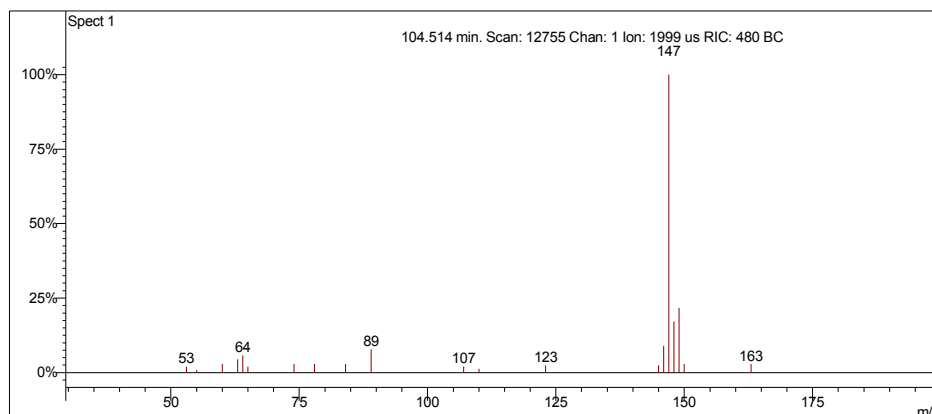
Scan 22454 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 22454, Time: 100.873 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 100.873 min. Scan: 22454 Chan: 1 Ion: 583 us RIC: 65337
Pair Count: 57 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 12755 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 12755, Time: 104.514 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 104.514 min. Scan: 12755 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 480 BC
 Pair Count: 20 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
146	$[M]^+ = C_{11}H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
131	$[M-15]^+ = C_{10}H_{11}^+$	Perda de metila.
115	$C_9H_7^+$	Perda de etila com rearranjos de hidrogênio.
105	$C_8H_{10}^+$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático com 11 carbonos.		

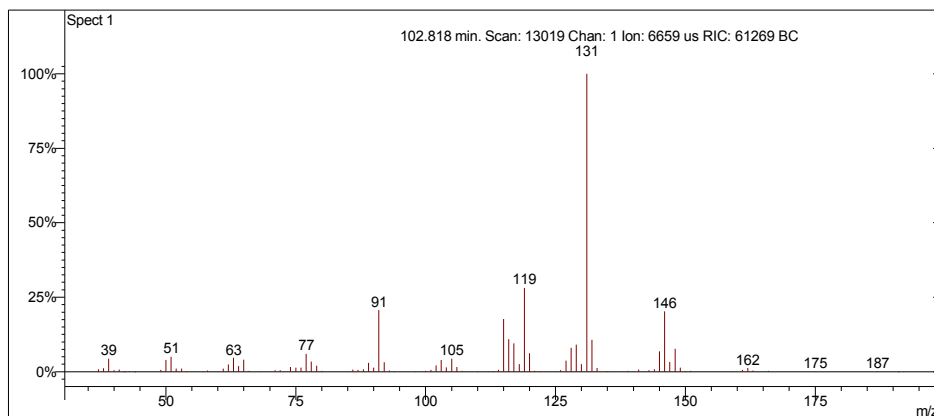
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 147$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{14} = \text{C}_{11}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 147$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{14} = \text{C}_{11}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 76

Amostra de Gasolina Comum

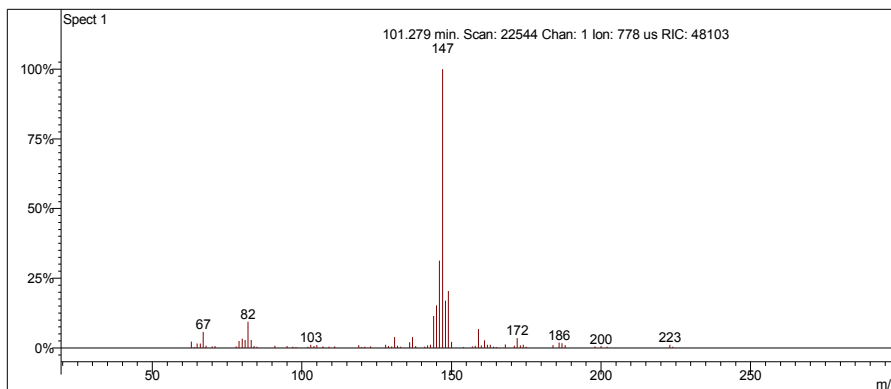
Scan 13019 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 13019, Time: 102.818 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 102.818 min. Scan: 13019 Chan: 1 Ion: 6659 us RIC: 61269 BC
Pair Count: 105 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

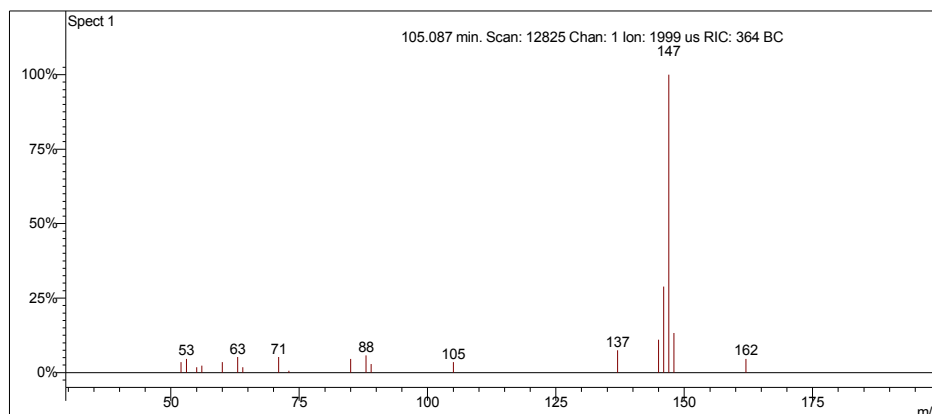
Scan 22544 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 22544, Time: 101.279 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 101.279 min. Scan: 22544 Chan: 1 Ion: 778 us RIC: 48103
Pair Count: 75 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 12825 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 12825, Time: 105.087 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 105.087 min. Scan: 12825 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 364 BC
 Pair Count: 19 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
146	$[M]^{+*} = C_{11}H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
131	$[M-15]^{+} = C_{10}H_{11}^{+}$	Perda de metila.
115	$C_9H_7^{+}$	Perda de etila com rearranjos de hidrogênio.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático com 11 carbonos.		

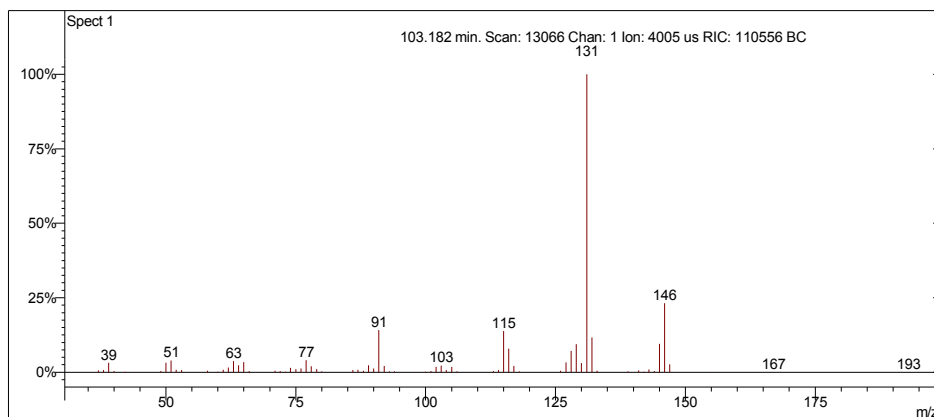
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 147$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{14} = \text{C}_{11}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 147$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{14} = \text{C}_{11}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 77

Amostra de Gasolina Comum

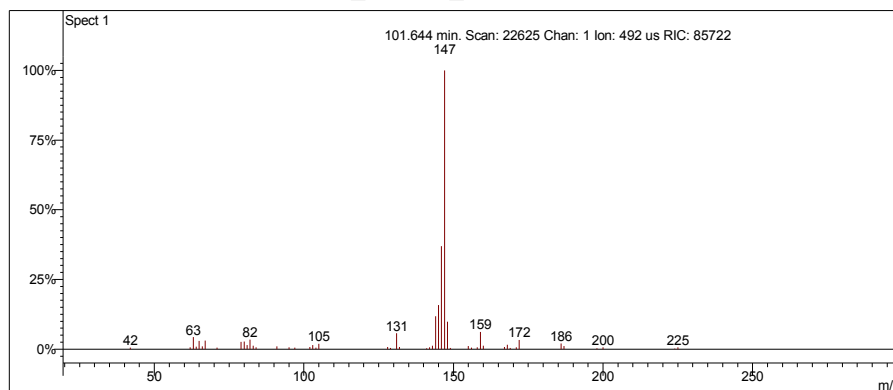
Scan 13066 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 13066, Time: 103.182 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 103.182 min. Scan: 13066 Chan: 1 Ion: 4005 us RIC: 110556 BC
Pair Count: 82 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

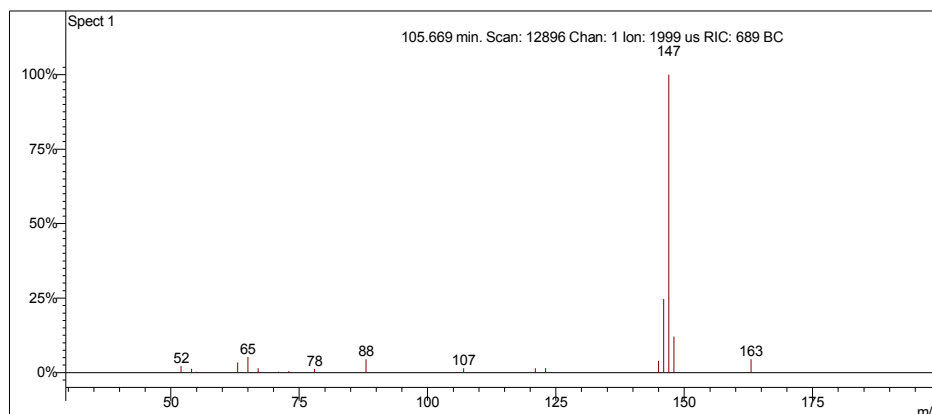
Scan 22625 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 22625, Time: 101.644 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 101.644 min. Scan: 22625 Chan: 1 Ion: 492 us RIC: 85722
Pair Count: 50 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 12896 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 12896, Time: 105.669 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 105.669 min. Scan: 12896 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 689 BC
 Pair Count: 18 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
146	$[M]^+ = C_{11}H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
131	$[M-15]^+ = C_{10}H_{11}^+$	Perda de metila.
115	$C_9H_7^+$	Perda de etila com rearranjos de hidrogênio.
105	$C_8H_{10}^+$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático com 11 carbonos.		

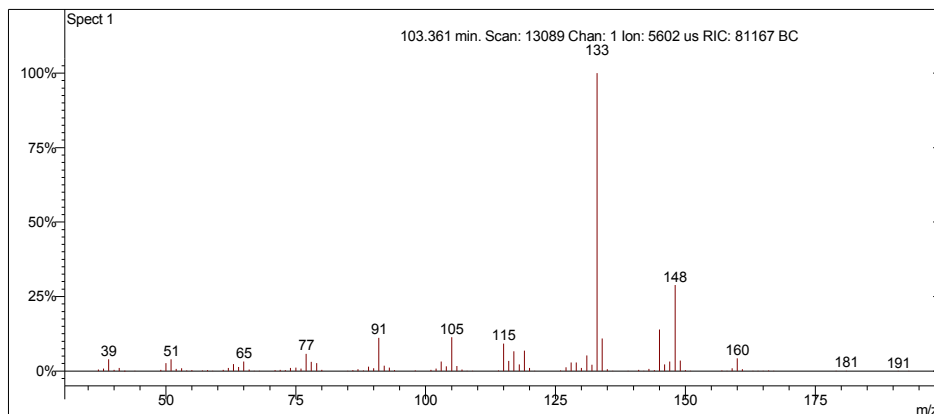
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 147$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\bullet} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \bullet\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{14} = \text{C}_{11}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 147$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\bullet} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \bullet\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{14} = \text{C}_{11}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 78

Amostra de Gasolina Comum

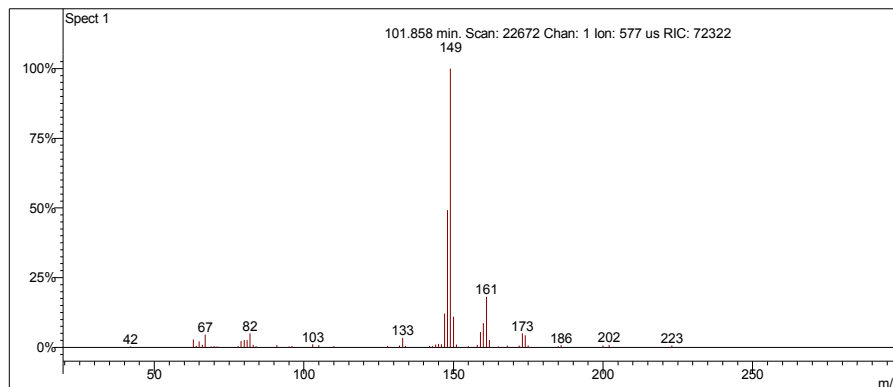
Scan 13089 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 13089, Time: 103.361 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 103.361 min. Scan: 13089 Chan: 1 Ion: 5602 us RIC: 81167 BC
Pair Count: 103 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

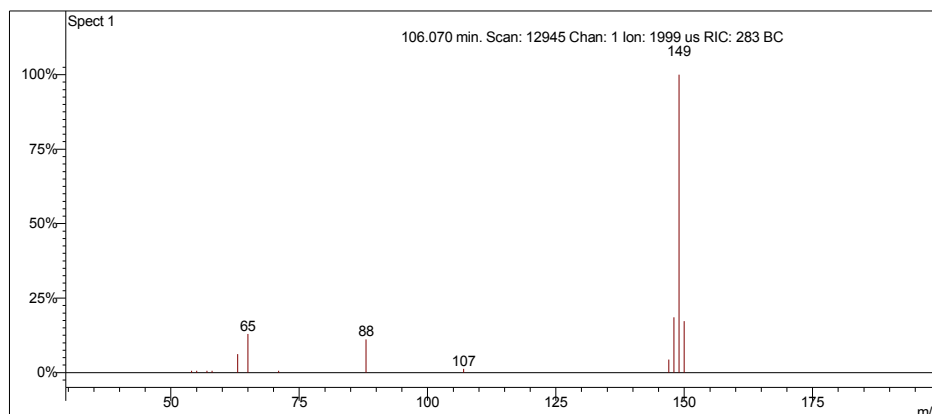
Scan 22672 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 22672, Time: 101.858 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 101.858 min. Scan: 22672 Chan: 1 Ion: 577 us RIC: 72322
Pair Count: 53 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 12945 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 12945, Time: 106.070 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 106.070 min. Scan: 12945 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 283 BC
Pair Count: 13 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
148	$[M]^{+} = C_{11}H_{16}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
133	$[M-15]^{+} = C_{10}H_{13}^{+}$	Perda de metila.
119	$C_9H_{11}^{+}$	Perda de etila.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 11 carbonos.		

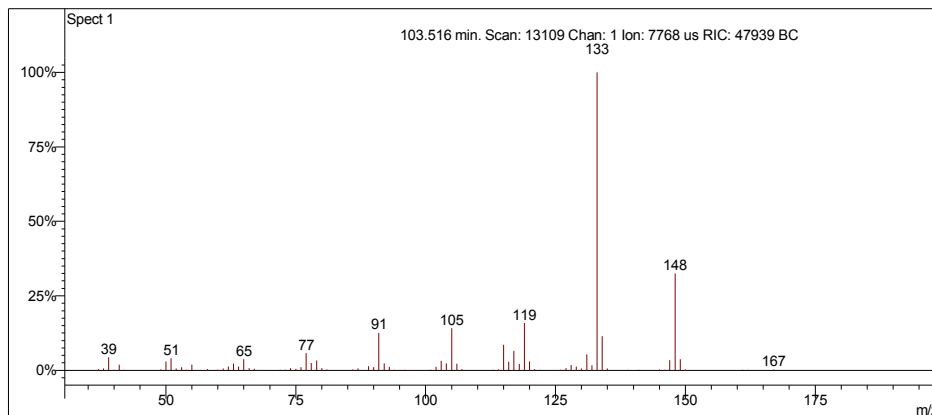
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 149$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{16} = \text{C}_{11}\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 149$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{16} = \text{C}_{11}\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 79

Amostra de Gasolina Comum

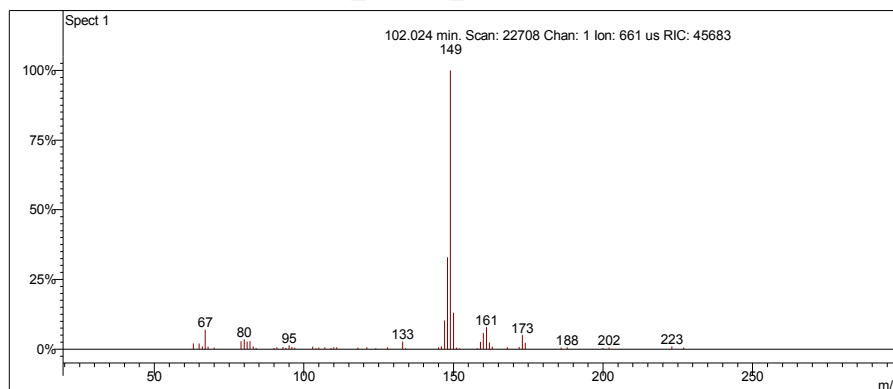
Scan 13109 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 13109, Time: 103.516 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 103.516 min. Scan: 13109 Chan: 1 Ion: 7768 us RIC: 47939 BC
Pair Count: 110 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

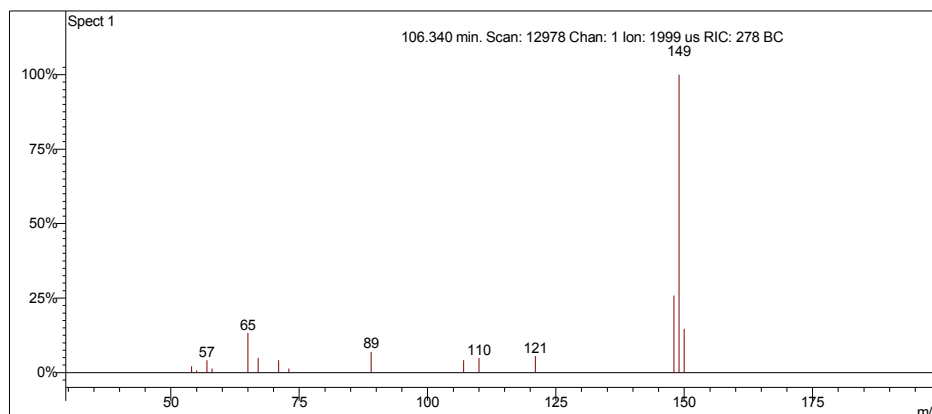
Scan 22708 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 22708, Time: 102.024 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 102.024 min. Scan: 22708 Chan: 1 Ion: 661 us RIC: 45683
Pair Count: 56 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 12978 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 12978, Time: 106.340 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 106.340 min. Scan: 12978 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 278 BC
Pair Count: 15 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
148	$[M]^+ = C_{11}H_{16}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
133	$[M-15]^+ = C_{10}H_{13}^+$	Perda de metila.
119	$C_9H_{11}^+$	Perda de etila.
105	$C_8H_{10}^+$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 11 carbonos.		

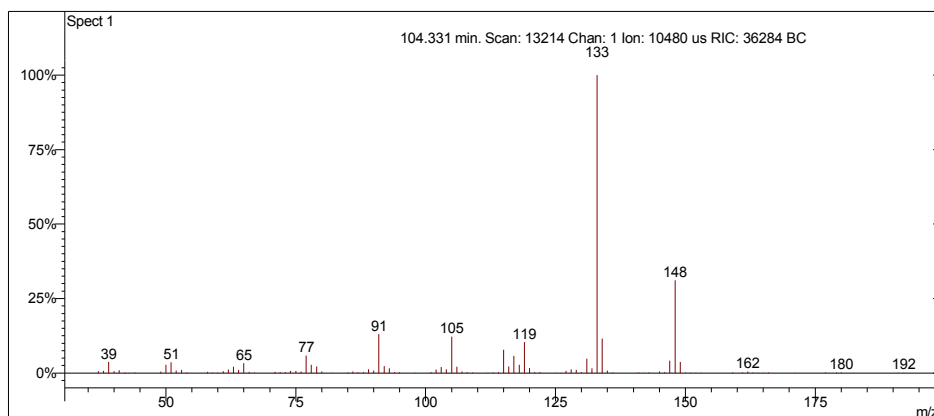
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 149$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{16} = \text{C}_{11}\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 149$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{16} = \text{C}_{11}\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 80

Amostra de Gasolina Comum

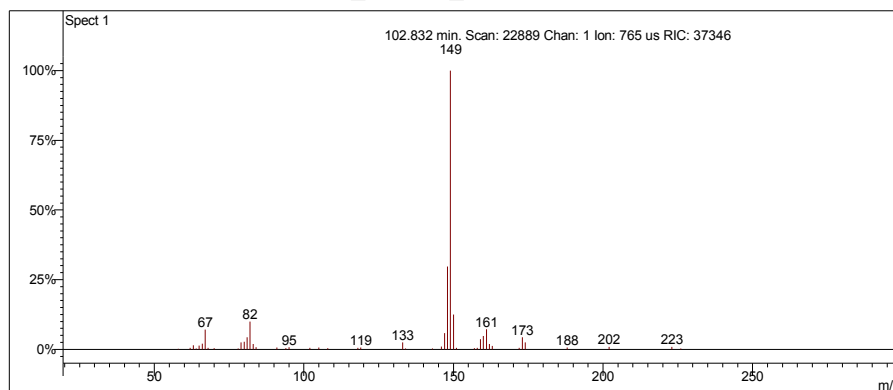
Scan 13214 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 13214, Time: 104.331 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 104.331 min. Scan: 13214 Chan: 1 Ion: 10480 us RIC: 36284 BC
Pair Count: 116 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

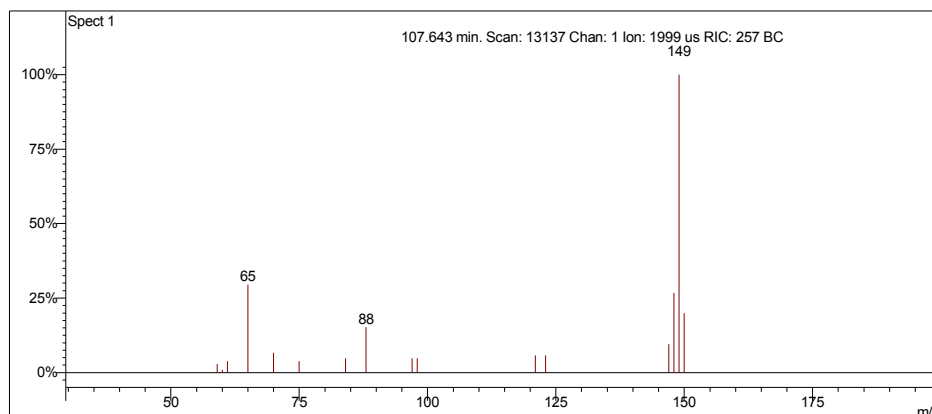
Scan 22889 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 22889, Time: 102.832 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 102.832 min. Scan: 22889 Chan: 1 Ion: 765 us RIC: 37346
Pair Count: 47 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 13137 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 13137, Time: 107.643 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 107.643 min. Scan: 13137 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 257 BC
Pair Count: 16 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
148	$[M]^+ = C_{11}H_{16}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica..
133	$[M-15]^+ = C_{10}H_{13}^+$	Perda de metila.
119	$C_9H_{11}^+$	Perda de etila.
105	$C_8H_{10}^+$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 11 carbonos.		

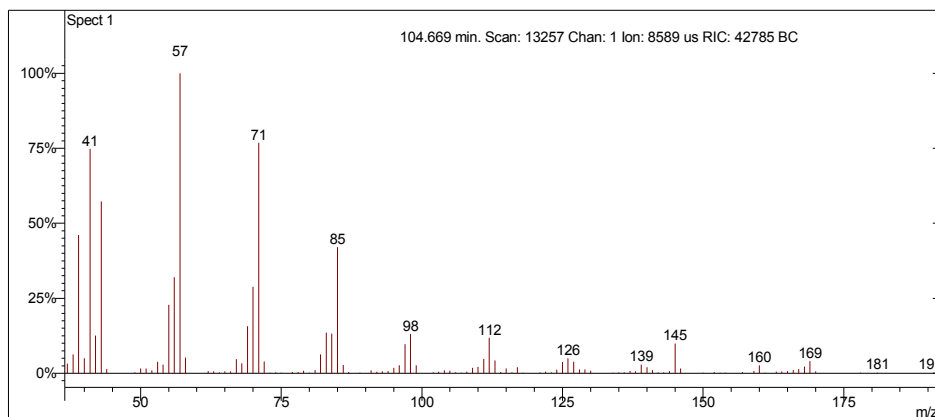
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 149$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{16} = \text{C}_{11}\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 149$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{16} = \text{C}_{11}\text{H}_{17}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Dodecano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 13257 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 13257, Time: 104.669 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 104.669 min. Scan: 13257 Chan: 1 Ion: 8589 us RIC: 42785 BC
Pair Count: 123 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

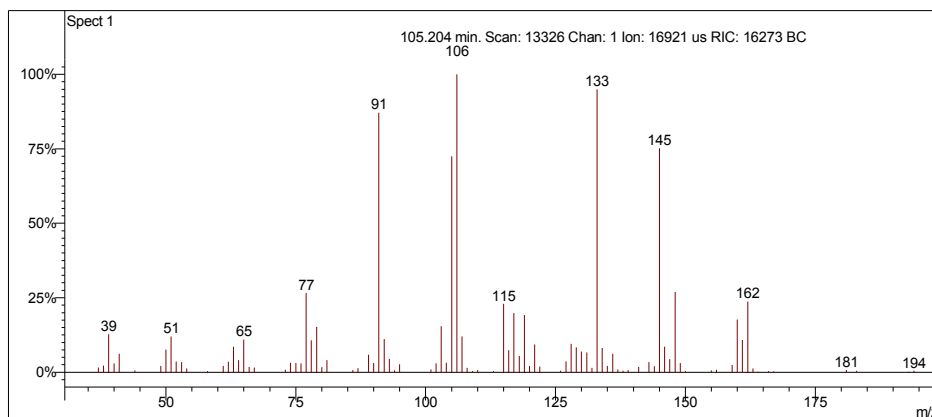
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
170 (ausente)	$[M]^{+} = C_{12}H_{26}^{+}$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
126	$C_9H_{18}^{+}$	Perda de propano.
112	$C_8H_{16}^{+}$	Perda de butano.
98	$C_7H_{14}^{+}$	Perda de pentano.
85	$C_6H_{13}^{+}$	Fragmentação alílica.
71	$C_5H_{11}^{+}$	Fragmentação alílica.
57	$C_4H_9^{+}$	Fragmentação alílica.

Desconhecido 81

Amostra de Gasolina Comum

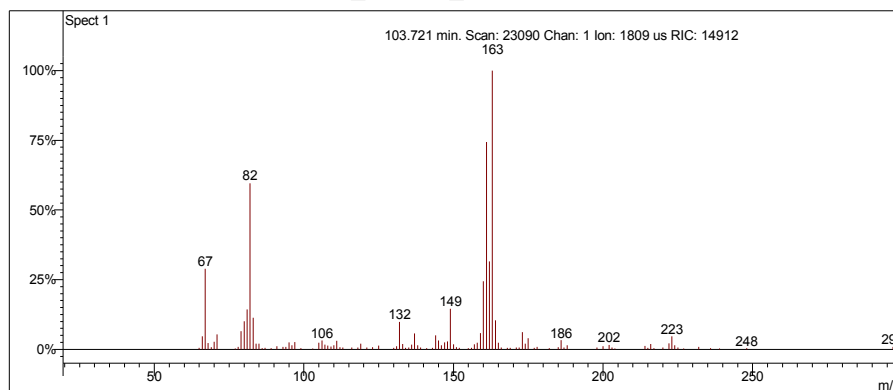
Scan 13326 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 13326, Time: 105.204 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 105.204 min. Scan: 13326 Chan: 1 Ion: 16921 us RIC: 16273 BC
Pair Count: 107 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 23090 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 23090, Time: 103.721 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 103.721 min. Scan: 23090 Chan: 1 Ion: 1809 us RIC: 14912
Pair Count: 110 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
162	$[M]^{+•} = C_{12}H_{18}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
145	$C_{11}H_{13}^{+}$	Contaminação de outro aromático.
133	$C_{10}H_{13}^{+}$	Perda de etila
119	$C_9H_{11}^{+}$	Perda de propila.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 12 carbonos. Coeluiu com outro aromático.		

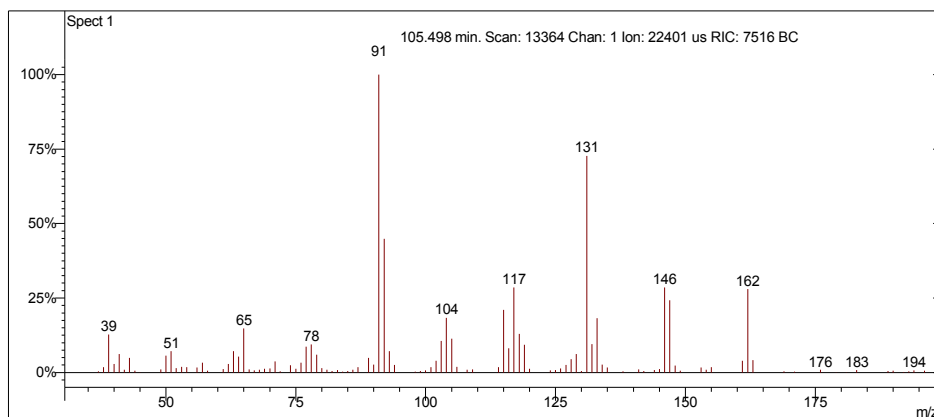
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 163$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+•} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_{12}H_{18} = C_{12}H_{19}^{+} + CH_3CN$		
Sem sinal		Metanol

Desconhecido 82

Amostra de Gasolina Comum

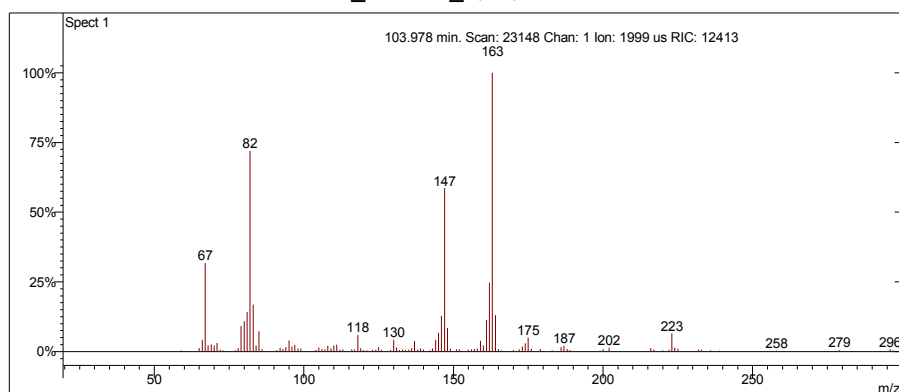
Scan 13364 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 13364, Time: 105.498 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 105.498 min. Scan: 13364 Chan: 1 Ion: 22401 us RIC: 7516 BC
Pair Count: 115 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 23148 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 23148, Time: 103.978 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 103.978 min. Scan: 23148 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 12413
Pair Count: 113 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
162	$[M]^{+•} = C_{12}H_{18}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
145	$C_{11}H_{13}^{+}$	Contaminação de outro aromático.
133	$C_{10}H_{13}^{+}$	Perda de etila
119	$C_9H_{11}^{+}$	Perda de propila.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 12 carbonos. Coelui com outro aromático.		

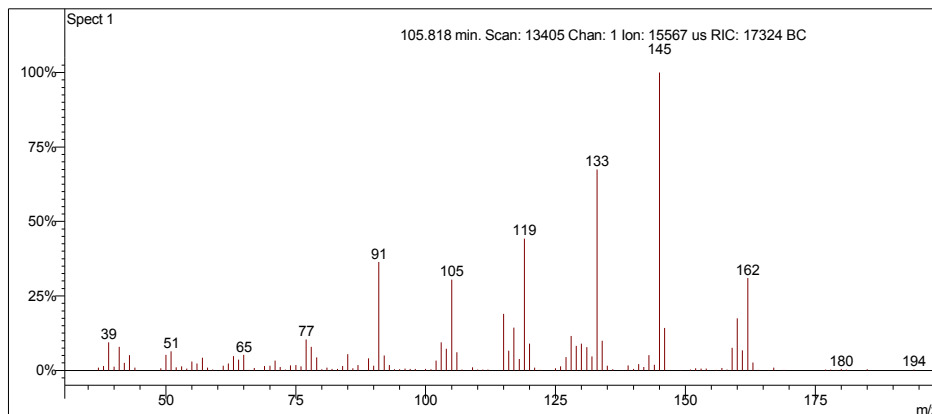
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+}$ = 163	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+•} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_{12}H_{18} = C_{12}H_{19}^{+} + CH_3CN$		
Sem sinal		Metanol

Desconhecido 83

Amostra de Gasolina Comum

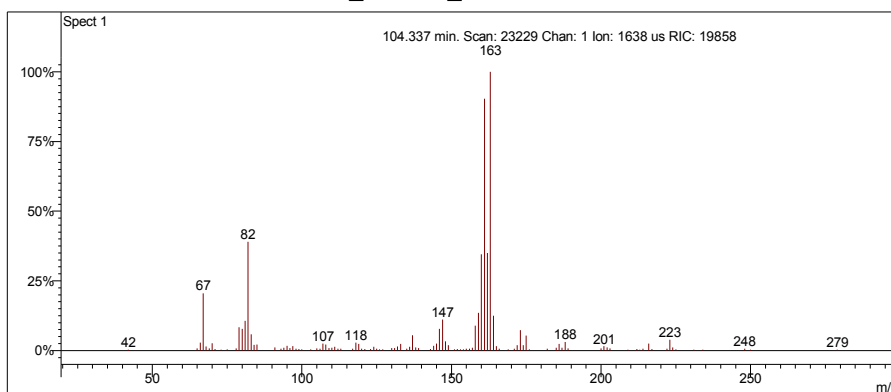
Scan 13405 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 13405, Time: 105.818 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 105.818 min. Scan: 13405 Chan: 1 Ion: 15567 us RIC: 17324 BC
Pair Count: 130 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 23229 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 23229, Time: 104.337 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 104.337 min. Scan: 23229 Chan: 1 Ion: 1638 us RIC: 19858
Pair Count: 111 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
162	$[M]^{+} = C_{12}H_{18}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
145	$C_{11}H_{13}^{+}$	Contaminação de outro aromático.
133	$C_{10}H_{13}^{+}$	Perda de etila
119	$C_9H_{11}^{+}$	Perda de propila.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 12 carbonos. Coelui com outro aromático.		

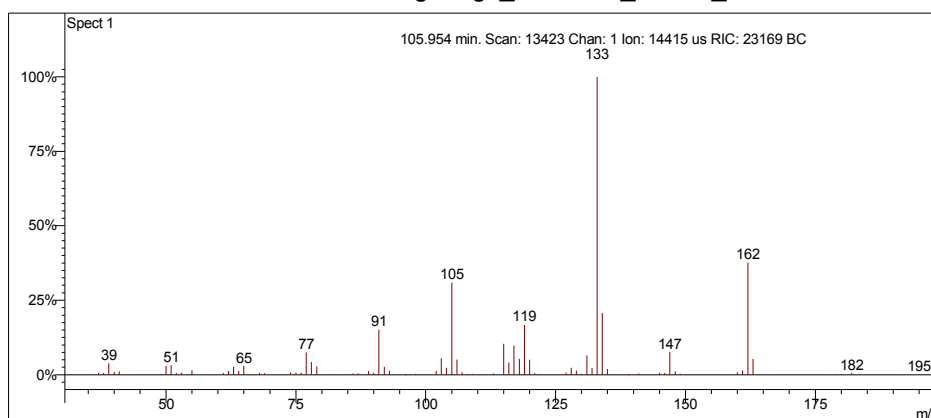
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 163$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_{12}H_{18} = C_{12}H_{19}^{+} + CH_3CN$		
Sem sinal		Metanol

Desconhecido 84

Amostra de Gasolina Comum

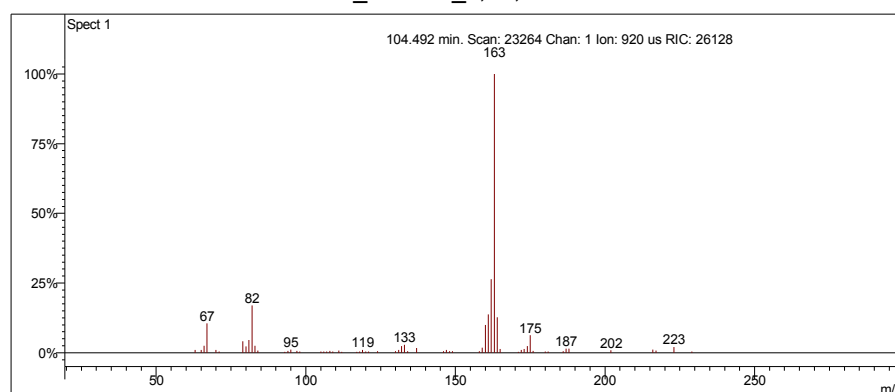
Scan 13423 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 13423, Time: 105.954 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 105.954 min. Scan: 13423 Chan: 1 Ion: 14415 us RIC: 23169 BC
Pair Count: 105 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

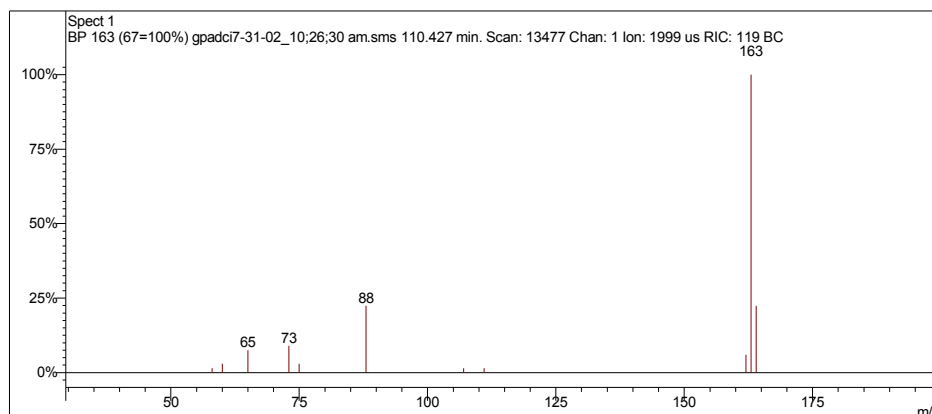
Scan 23264 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 23264, Time: 104.492 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 104.492 min. Scan: 23264 Chan: 1 Ion: 920 us RIC: 26128
Pair Count: 64 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 13477 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 13477, Time: 110.427 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 110.427 min. Scan: 13477 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 119 BC
Pair Count: 11 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
162	$[M]^{++} = C_{12}H_{18}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
147	$[M-15]^+ = C_{11}H_{15}^+$	Perda de metila.
133	$[M-29]^+ = C_{10}H_{13}^+$	Perda de etila.
119	$[M-43]^+ = C_9H_{11}^+$	Perda de C ₃ .
105	$C_8H_{10}^+$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 12 carbonos.		

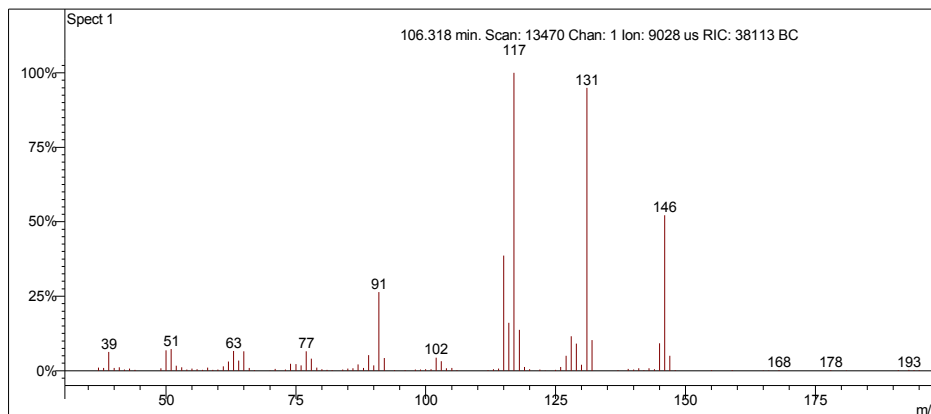
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 163$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{12}\text{H}_{18} = \text{C}_{12}\text{H}_{19}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 163$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{12}\text{H}_{18} = \text{C}_{12}\text{H}_{19}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 85

Amostra de Gasolina Comum

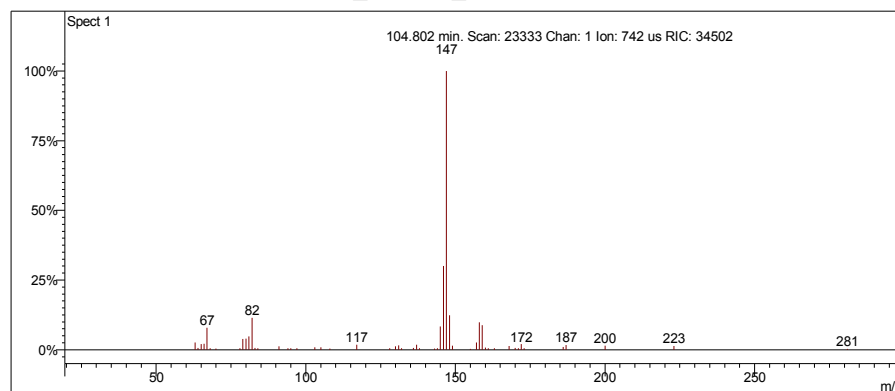
Scan 13470 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 13470, Time: 106.318 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 106.318 min. Scan: 13470 Chan: 1 Ion: 9028 us RIC: 38113 BC
Pair Count: 105 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

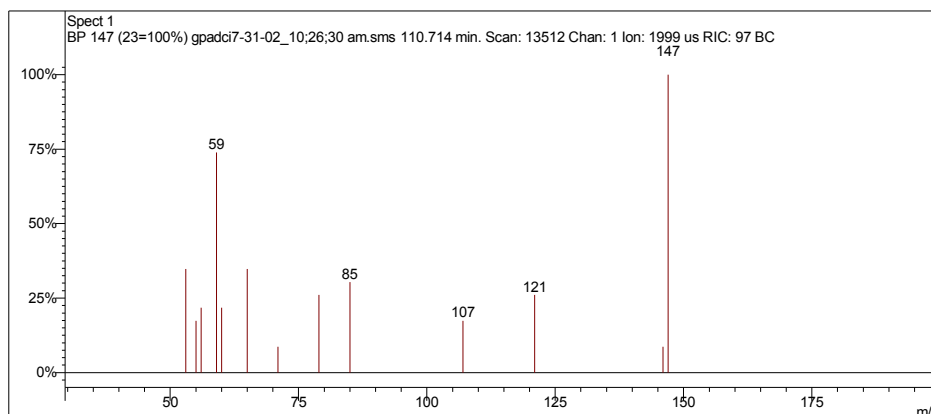
Scan 23333 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 23333, Time: 104.802 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 104.802 min. Scan: 23333 Chan: 1 Ion: 742 us RIC: 34502
Pair Count: 53 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 13512 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 13512, Time: 110.714 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 110.714 min. Scan: 13512 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 97 BC
Pair Count: 13 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
146	$[M]^+ = C_{11}H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
131	$[M-15]^+ = C_{10}H_{11}^+$	Perda de metila.
115	$C_9H_7^+$	Perda de etila com rearranjos de hidrogênio.
105	$C_8H_{10}^+$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático com 11 carbonos.		

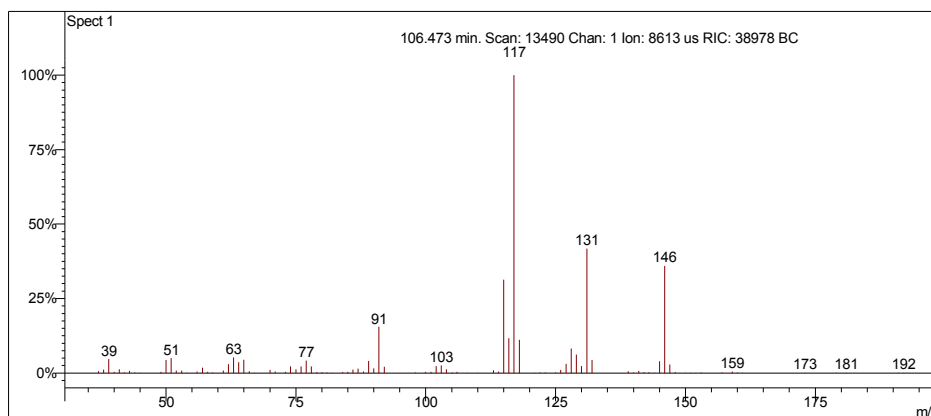
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 147$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{14} = \text{C}_{11}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 147$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{14} = \text{C}_{11}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 86

Amostra de Gasolina Comum

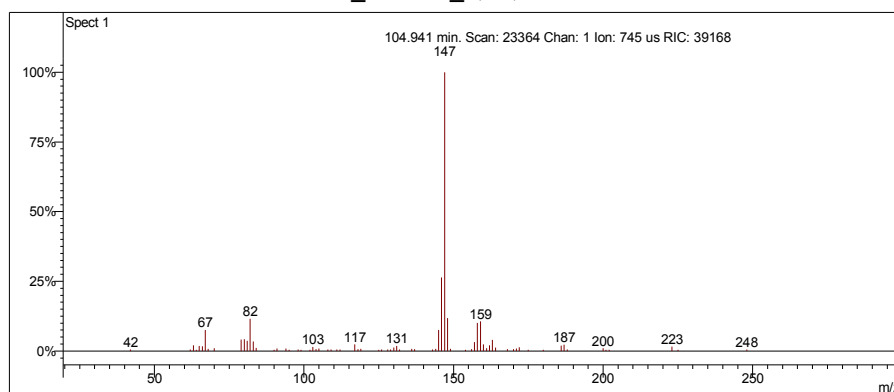
Scan 13490 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 13490, Time: 106.473 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 106.473 min. Scan: 13490 Chan: 1 Ion: 8613 us RIC: 38978 BC
Pair Count: 102 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

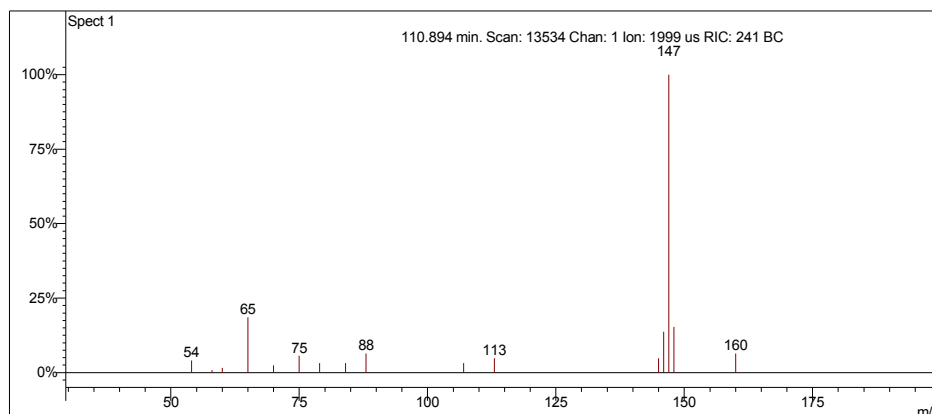
Scan 23364 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 23364, Time: 104.941 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 104.941 min. Scan: 23364 Chan: 1 Ion: 745 us RIC: 39168
Pair Count: 73 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 13534 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 13534, Time: 110.894 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 110.894 min. Scan: 13534 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 241 BC
 Pair Count: 16 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
146	$[M]^+ = C_{11}H_{14}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
131	$[M-15]^+ = C_{10}H_{11}^+$	Perda de metila.
115	$C_9H_7^+$	Perda de etila com rearranjos de hidrogênio.
105	$C_8H_{10}^+$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático com 11 carbonos.		

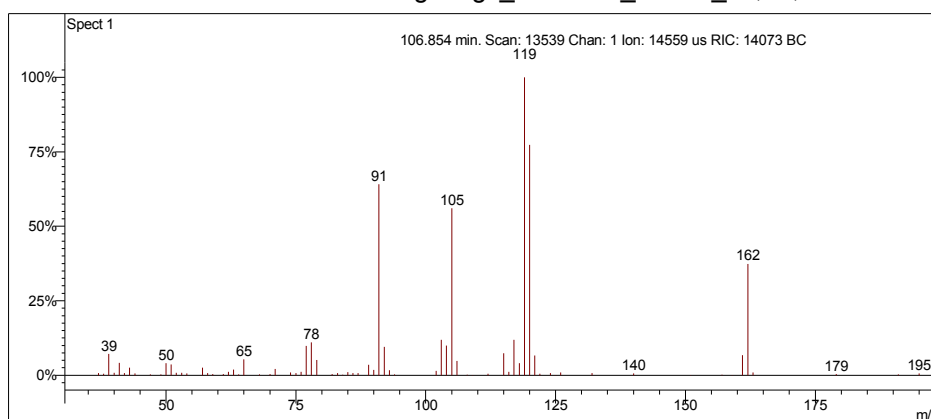
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 147$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{14} = \text{C}_{11}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 147$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{14} = \text{C}_{11}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 87

Amostra de Gasolina Comum

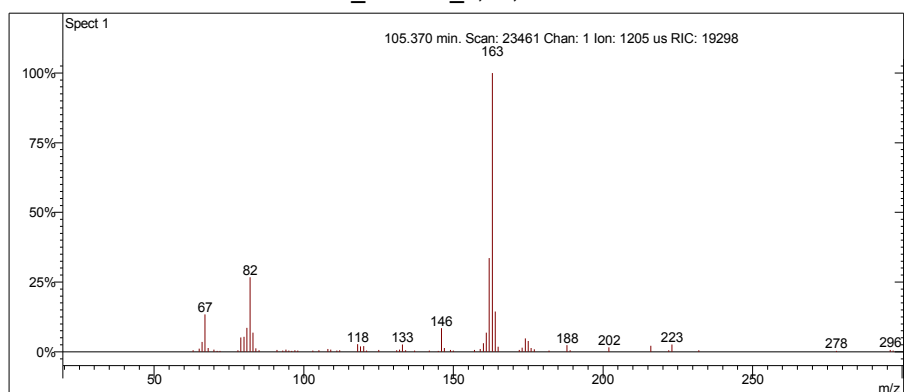
Scan 13539 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 13539, Time: 106.854 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 106.854 min. Scan: 13539 Chan: 1 Ion: 14559 us RIC: 14073 BC
Pair Count: 79 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 23461 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 23461, Time: 105.370 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 105.370 min. Scan: 23461 Chan: 1 Ion: 1205 us RIC: 19298
Pair Count: 70 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
162	$[M]^{+\bullet} = C_{12}H_{18}^{+\bullet}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
119	$[M-43]^{+\bullet} = C_9H_{11}^{+\bullet}$	Perda de propano com rearranjo de hidrogênio.
105	$C_8H_{10}^{+\bullet}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+\bullet}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
78	$C_6H_6^{+\bullet}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+\bullet} - 26]^{+\bullet} = C_5H_5^{+\bullet}$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 12 carbonos.		

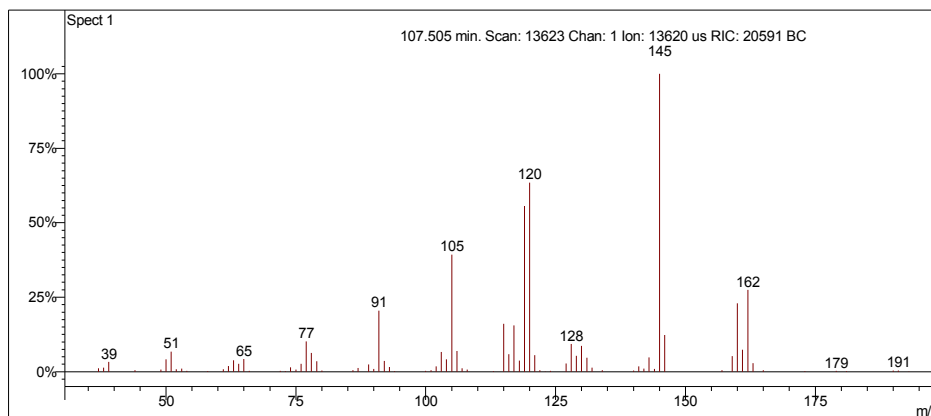
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+\bullet} = 163$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+\bullet} + CH_3CN = CH_3CNH^{+\bullet} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+\bullet} + C_{12}H_{18} = C_{12}H_{19}^{+\bullet} + CH_3CN$		
Sem sinal		Metanol

Desconhecido 88

Amostra de Gasolina Comum

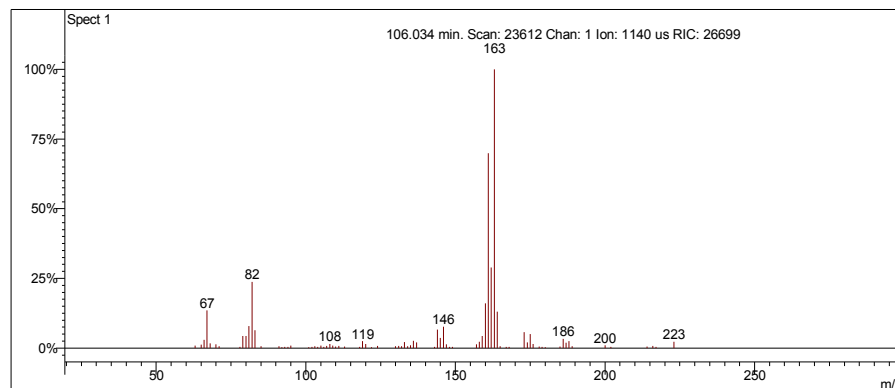
Scan 13623 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 13623, Time: 107.505 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 107.505 min. Scan: 13623 Chan: 1 Ion: 13620 us RIC: 20591 BC
Pair Count: 91 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 23612 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 23612, Time: 106.034 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 106.034 min. Scan: 23612 Chan: 1 Ion: 1140 us RIC: 26699
Pair Count: 80 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
162	$[M]^+ = C_{12}H_{18}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
145	$C_{11}H_{13}^+$	Contaminação de outro aromático.
120	$C_9H_{12}^+$	Perda de C_3 .
105	$C_8H_{10}^+$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^+ - 26]^+ = C_5H_5^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 12 carbonos. Coelui com outro aromático.		

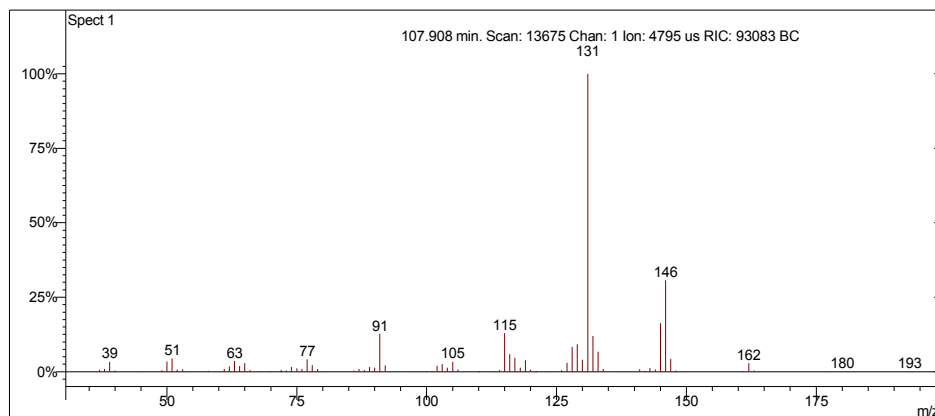
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 163$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_{12}H_{18} = C_{12}H_{19}^+ + CH_3CN$		
Sem sinal	.	Metanol

Desconhecido 89

Amostra de Gasolina Comum

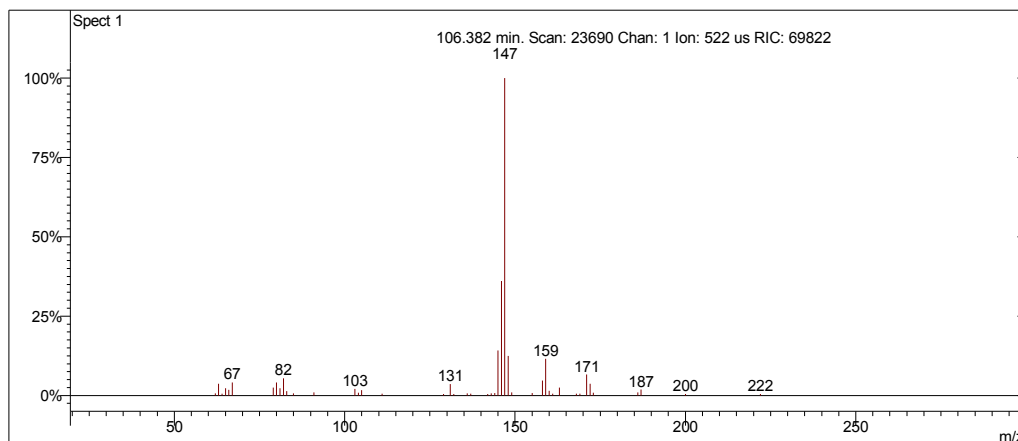
Scan 13675 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 13675, Time: 107.908 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 107.908 min. Scan: 13675 Chan: 1 Ion: 4795 us RIC: 93083 BC
Pair Count: 88 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

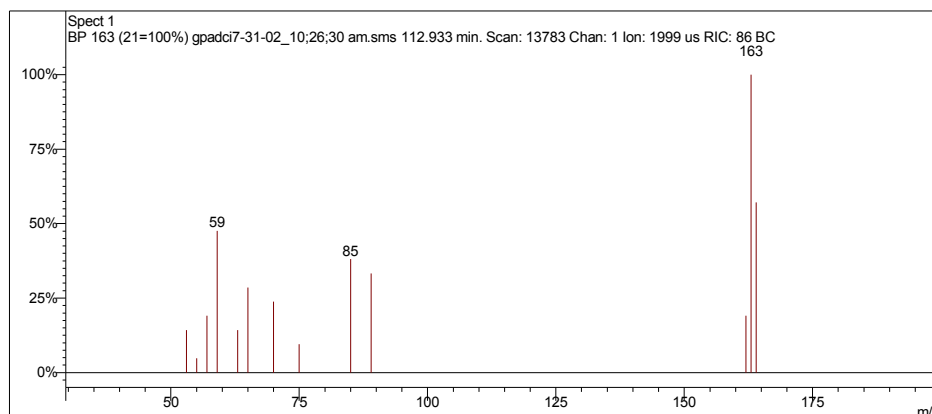
Scan 23690 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 23690, Time: 106.382 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 106.382 min. Scan: 23690 Chan: 1 Ion: 522 us RIC: 69822
Pair Count: 45 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 13783 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
Scan No: 13783, Time: 112.933 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 112.933 min. Scan: 13783 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 86 BC
Pair Count: 13 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
146	$[M]^{+} = C_{11}H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
131	$[M-15]^{+} = C_{10}H_{11}^{+}$	Perda de metila.
115	$C_9H_7^{+}$	Perda de etila com rearranjos de hidrogênio.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.
<p>Conclusão: a substância é um aromático com 11 carbonos. Coelui com outro aromático (ver quadro ionização química).</p>		

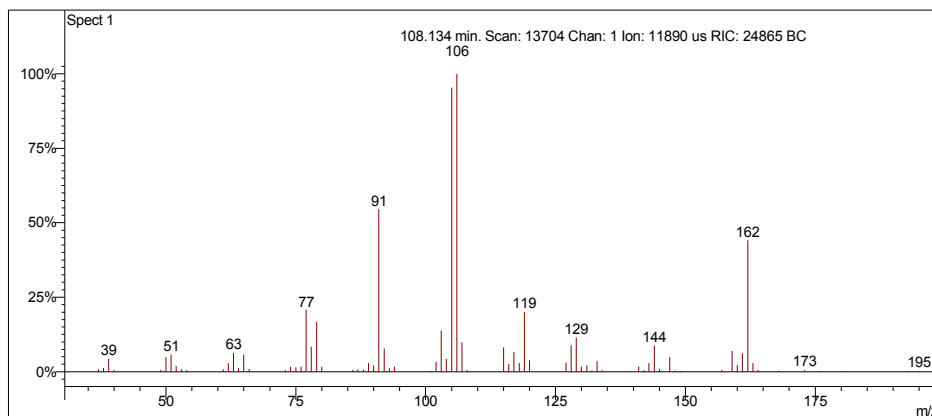
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 147$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{14} = \text{C}_{11}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 163$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{12}\text{H}_{18} = \text{C}_{12}\text{H}_{19}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 90

Amostra de Gasolina Comum

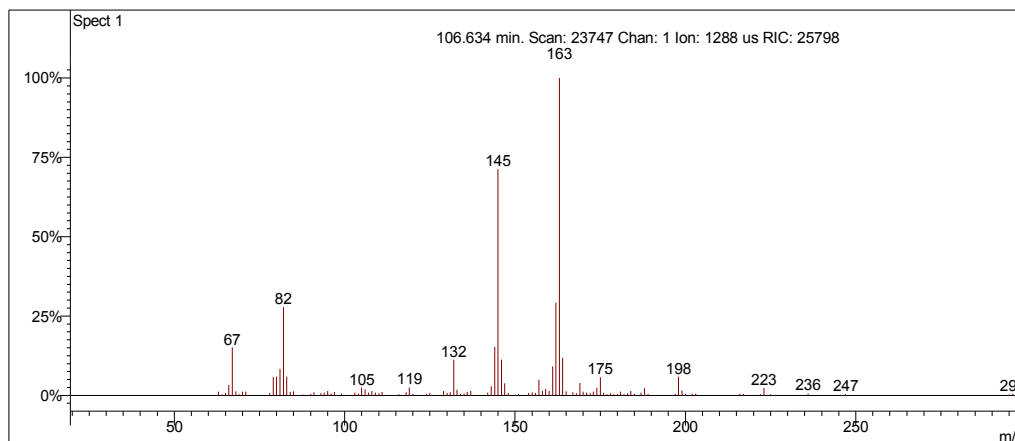
Scan 13704 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 13704, Time: 108.134 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 108.134 min. Scan: 13704 Chan: 1 Ion: 11890 us RIC: 24865 BC
Pair Count: 97 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 23747 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 23747, Time: 106.634 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 106.634 min. Scan: 23747 Chan: 1 Ion: 1288 us RIC: 25798
Pair Count: 107 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
162	$[M]^{+} = C_{12}H_{18}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
147	$[M-15]^{+} = C_{11}H_{15}^{+}$	Perda de metila.
119	$[M-43]^{+} = C_9H_{11}^{+}$	Perda de propila.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.
<p>Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 12 carbonos. Coelui com outro aromático.</p>		

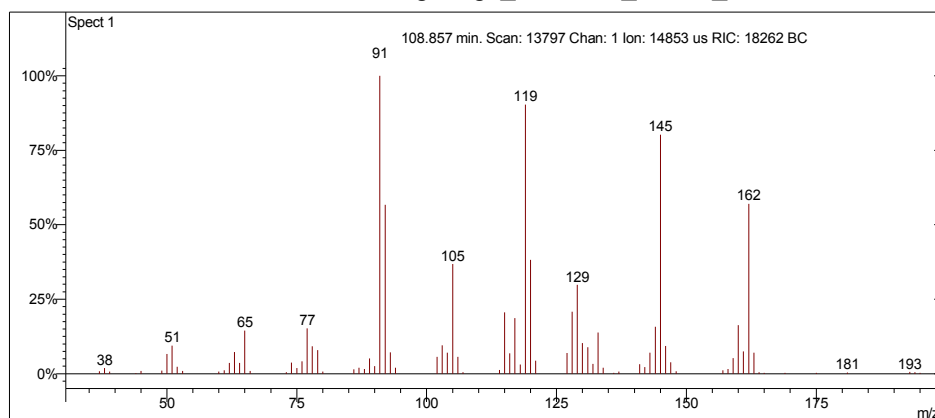
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 163$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_{12}H_{18} = C_{12}H_{19}^{+} + CH_3CN$		
Sem sinal		Metanol

Desconhecido 91

Amostra de Gasolina Comum

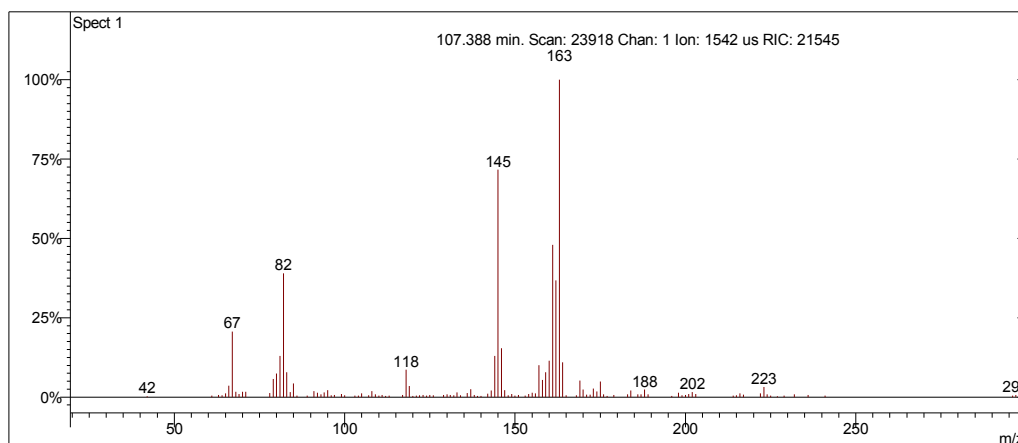
Scan 13797 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 13797, Time: 108.857 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 108.857 min. Scan: 13797 Chan: 1 Ion: 14853 us RIC: 18262 BC
Pair Count: 91 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 23918 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 23918, Time: 107.388 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 107.388 min. Scan: 23918 Chan: 1 Ion: 1542 us RIC: 21545
Pair Count: 123 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
162	$[M]^{+} = C_{12}H_{18}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
145	$[M-15]^{+} = C_{11}H_{15}^{+}$	Contaminação de outro aromático.
133	$[M-29]^{+} = C_{10}H_{13}^{+}$	Perda de etila.
119	$[M-43]^{+} = C_9H_{11}^{+}$	Perda de propila.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 12 carbonos. Coelui com outro aromático.		

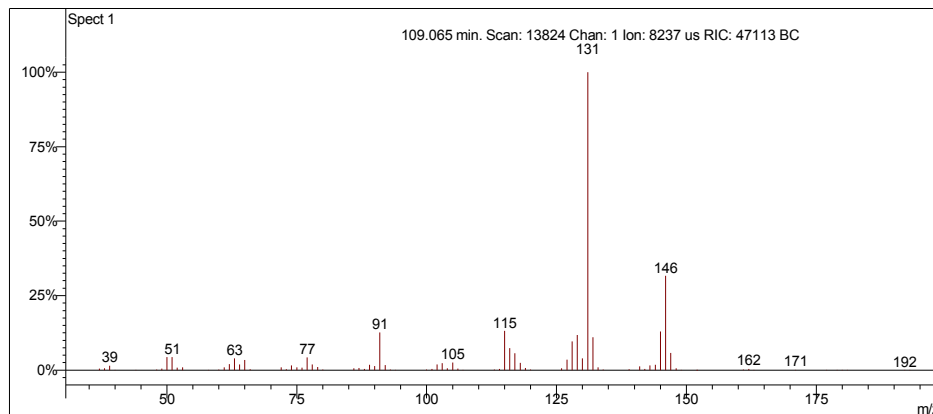
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 163$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_{12}H_{18} = C_{12}H_{19}^{+} + CH_3CN$		
Sem sinal		Metanol

Desconhecido 92

Amostra de Gasolina Comum

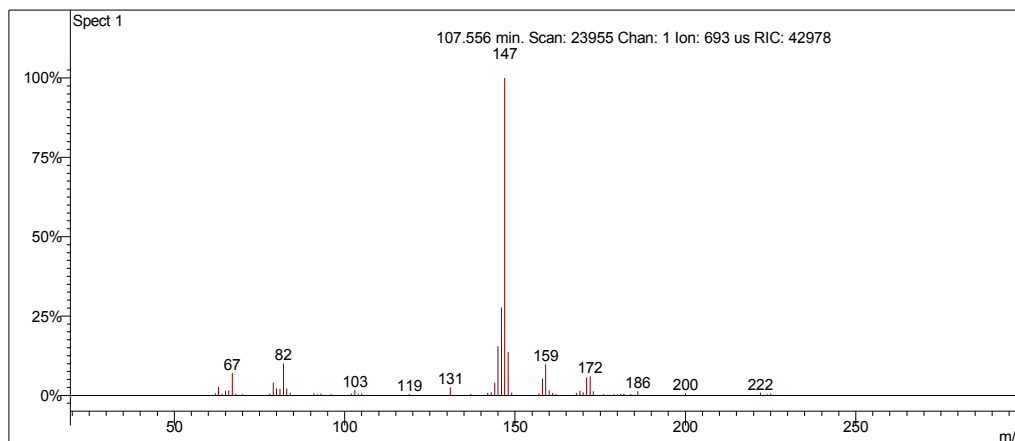
Scan 13824 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 13824, Time: 109.065 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 109.065 min. Scan: 13824 Chan: 1 Ion: 8237 us RIC: 47113 BC
Pair Count: 88 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

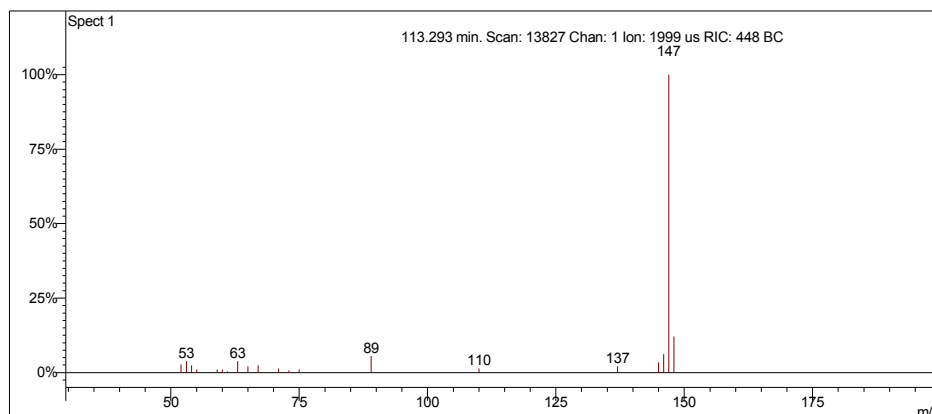
Scan 23955 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 23955, Time: 107.556 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 107.556 min. Scan: 23955 Chan: 1 Ion: 693 us RIC: 42978
Pair Count: 57 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 13827 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 13827, Time: 113.293 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 113.293 min. Scan: 13827 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 448 BC
 Pair Count: 20 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
146	$[M]^{+*} = C_{11}H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
131	$[M-15]^{+} = C_{10}H_{11}^{+}$	Perda de metila.
115	$C_9H_7^{+}$	Perda de etila com rearranjos de hidrogênio.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático com 11 carbonos.		

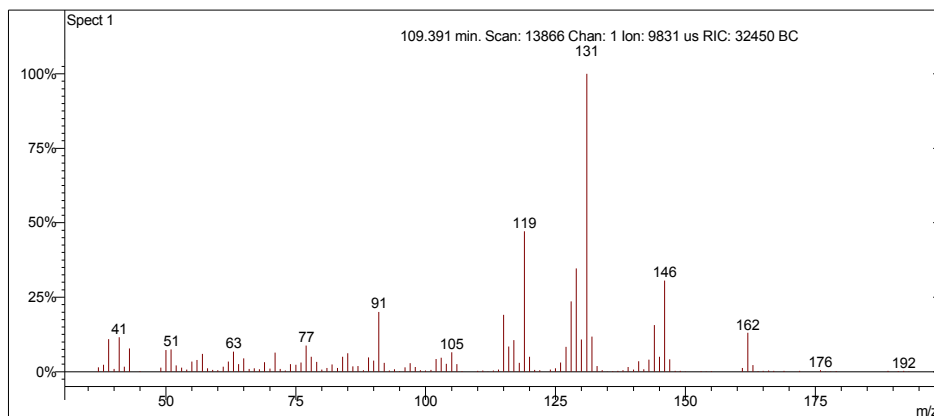
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 147$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$\text{CH}_3\text{CN}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{CN} = \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \cdot\text{CH}_2\text{CN}$ $\text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{14} = \text{C}_{11}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{CN}$		
$[M+1]^+ = 147$	Transferência de próton.	Metanol
$\text{CH}_3\text{OH}^{+\cdot} + \text{CH}_3\text{OH} = \text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \cdot\text{CH}_2\text{OH}$ $\text{CH}_3\text{OH}_2^+ + \text{C}_{11}\text{H}_{14} = \text{C}_{11}\text{H}_{15}^+ + \text{CH}_3\text{OH}$		

Desconhecido 93

Amostra de Gasolina Comum

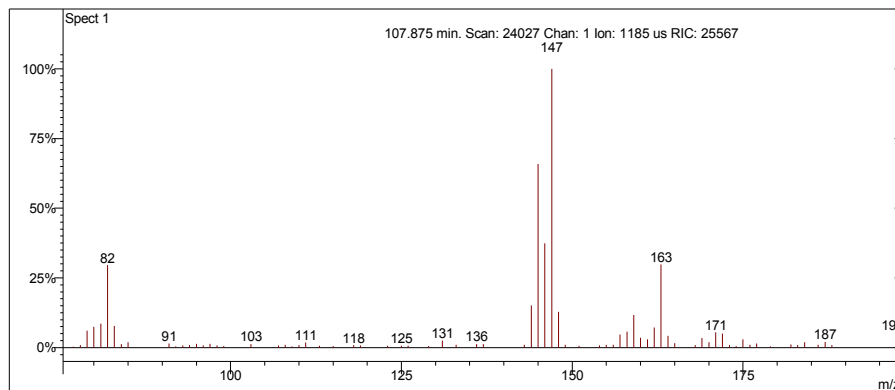
Scan 13866 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 13866, Time: 109.391 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 109.391 min. Scan: 13866 Chan: 1 Ion: 9831 us RIC: 32450 BC
Pair Count: 136 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 24027 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 24027, Time: 107.875 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 107.875 min. Scan: 24027 Chan: 1 Ion: 1185 us RIC: 25567
Pair Count: 98 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
162	$[M]^{+} = C_{12}H_{18}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
146	$C_{11}H_{14}^{+}$	Contaminação de outro aromático.
131	$C_{10}H_{11}^{+}$	Contaminação de outro aromático.
119	$C_9H_{11}^{+}$	Perda de C_3 .
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.

Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 12 carbonos. Coelui com outro aromático.

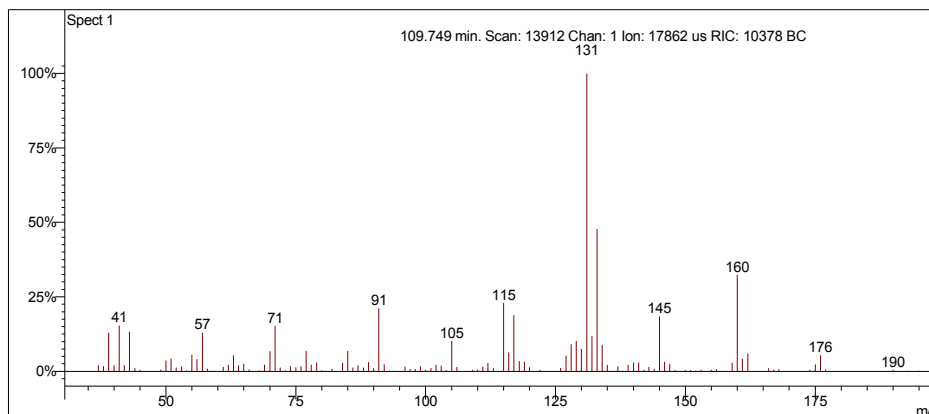
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 163$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_{12}H_{18} = C_{12}H_{19}^{+} + CH_3CN$		
$[M+1]^{+} = 147$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_{11}H_{14} = C_{11}H_{15}^{+} + CH_3CN$		

Desconhecido 94

Amostra de Gasolina Comum

Scan 13912 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 13912, Time: 109.749 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 109.749 min. Scan: 13912 Chan: 1 Ion: 17862 us RIC: 10378 BC
Pair Count: 128 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

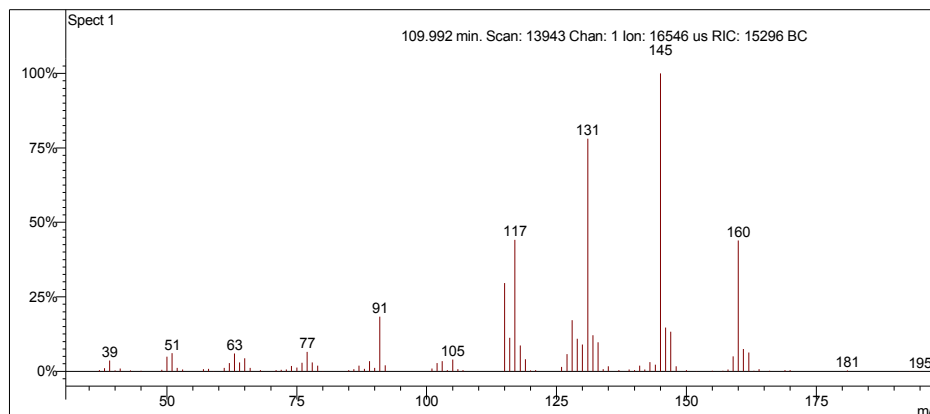
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
160	$[M]^{+*} = C_{12}H_{16}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
145	$C_{11}H_{13}^{+}$	Perda de metila.
131	$C_{10}H_{11}^{+}$	Perda de etila.
117	$C_9H_{11}^{+}$	Perda de propila.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 12 carbonos. Coelui com outra substância.		

Desconhecido 95

Amostra de Gasolina Comum

Scan 13943 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
 Scan No: 13943, Time: 109.992 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 109.992 min. Scan: 13943 Chan: 1 Ion: 16546 us RIC: 15296 BC
 Pair Count: 105 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

Interpretação do Fragmentograma

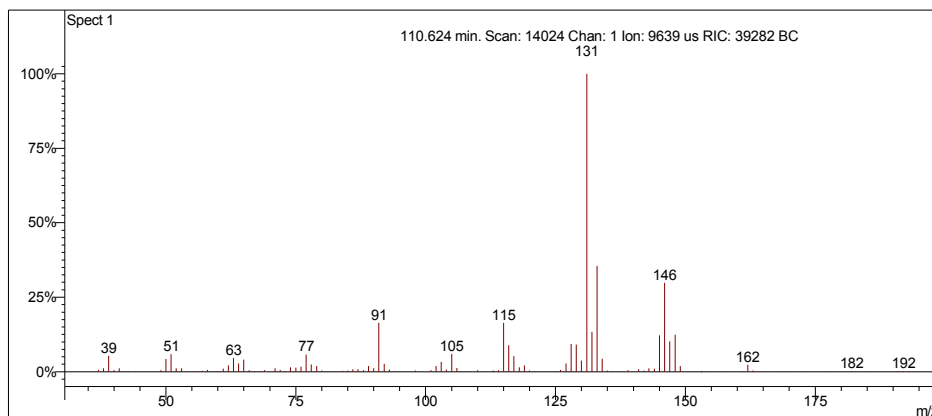
Íon m/z	Fragmento	Observação
160	$[M]^+ = C_{12}H_{16}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
145	$C_{11}H_{13}^+$	Perda de metila.
131	$C_{10}H_{11}^+$	Perda de etila.
117	$C_9H_9^+$	Perda de propila.
105	$C_8H_9^+$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.

Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 12 carbonos.

Desconhecido 96

Amostra de Gasolina Comum

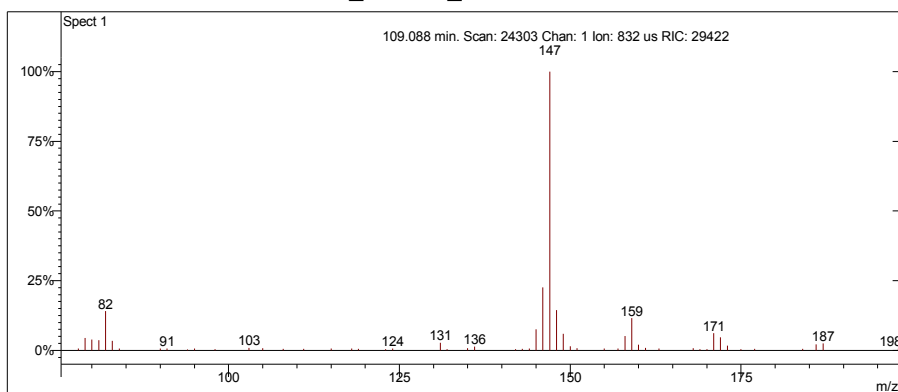
Scan 14024 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 14024, Time: 110.624 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 110.624 min. Scan: 14024 Chan: 1 Ion: 9639 us RIC: 39282 BC
Pair Count: 122 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 24303 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 24303, Time: 109.088 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 109.088 min. Scan: 24303 Chan: 1 Ion: 832 us RIC: 29422
Pair Count: 63 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
146	$[M]^{+} = C_{11}H_{14}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância.
131	$[M-15]^{+} = C_{10}H_{11}^{+}$	Perda de metila.
115	$C_9H_7^{+}$	Perda de etila com rearranjos de hidrogênio.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
65	$[C_7H_7^{+} - 26]^{+} = C_5H_5^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático com 11 carbonos.		

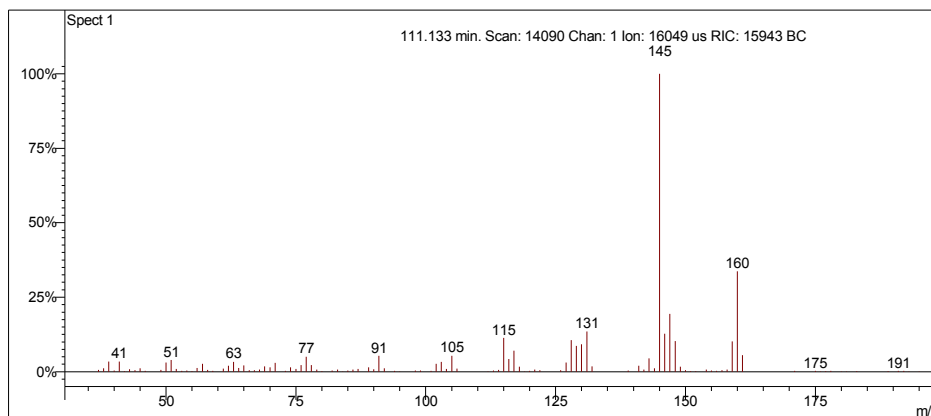
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 147$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_{11}H_{14} = C_{11}H_{15}^{+} + CH_3CN$		
Sem sinal		Metanol

Desconhecido 97

Amostra de Gasolina Comum

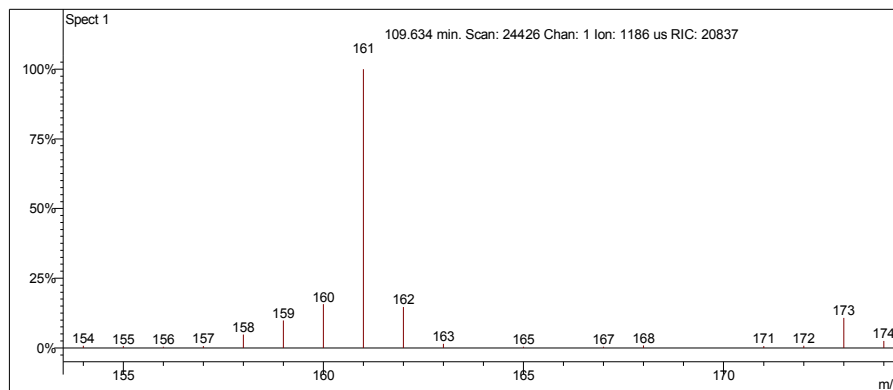
Scan 14090 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 14090, Time: 111.133 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 111.133 min. Scan: 14090 Chan: 1 Ion: 16049 us RIC: 15943 BC
Pair Count: 120 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 24426 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 24426, Time: 109.634 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 109.634 min. Scan: 24426 Chan: 1 Ion: 1186 us RIC: 20837
Pair Count: 103 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
160	$[M]^+ = C_{12}H_{16}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
145	$C_{11}H_{13}^+$	Perda de metila.
131	$C_{10}H_{11}^+$	Perda de etila.
117	$C_9H_9^+$	Perda de propila.
105	$C_8H_9^+$	Formação do íon tropílio substituído.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
63	$C_5H_3^+$	
Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 12 carbonos.		

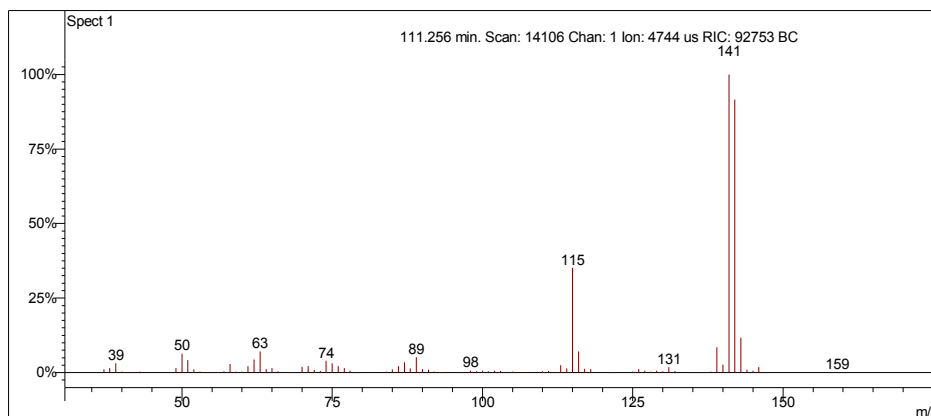
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 161$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+\bullet} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \bullet CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_{12}H_{16} = C_{12}H_{17}^+ + CH_3CN$		
Sem sinal		Metanol

2-metilnaftaleno

Amostra de Gasolina Comum

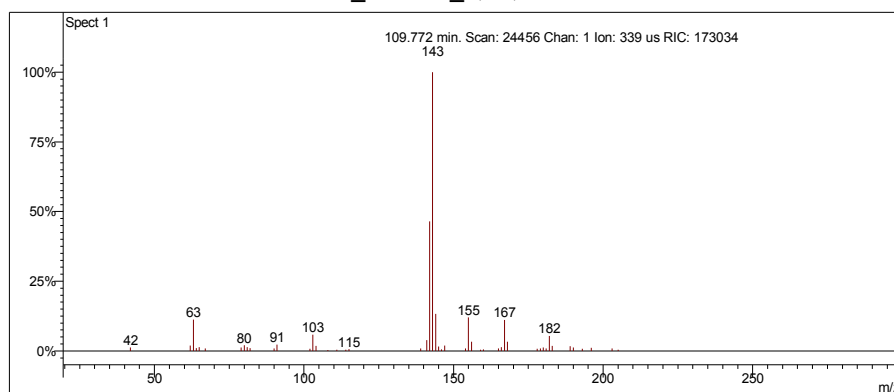
Scan 14106 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 14106, Time: 111.256 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 111.256 min. Scan: 14106 Chan: 1 Ion: 4744 us RIC: 92753 BC
Pair Count: 112 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

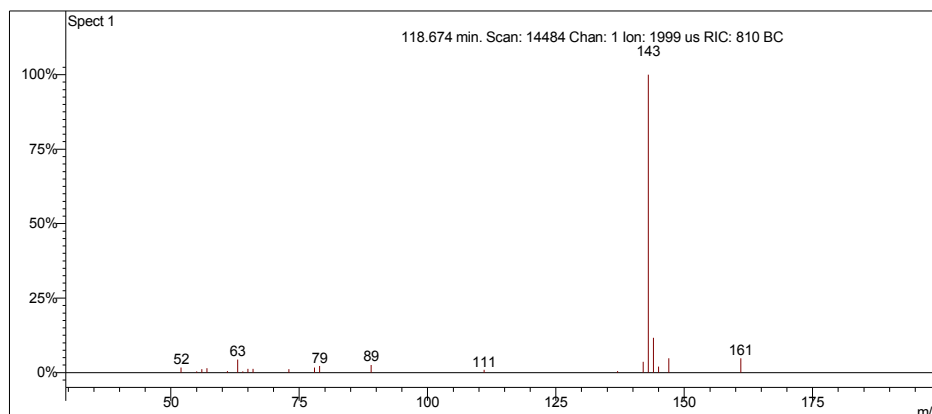
Scan 24456 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 24456, Time: 109.772 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 109.772 min. Scan: 24456 Chan: 1 Ion: 339 us RIC: 173034
Pair Count: 48 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 14484 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 14484, Time: 118.674 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 118.674 min. Scan: 14484 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 810 BC
 Pair Count: 21 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
142	$[M]^{+} = C_{11}H_{10}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica..
141	$[M-1]^{+} = C_{11}H_{9}^{+}$	Perda de hidrogênio.
126	$C_{10}H_{6}^{+}$	Perda de metano.
115	$C_{9}H_{7}^{+}$	Perda de C_2H_3 com rearranjo de hidrogênio.

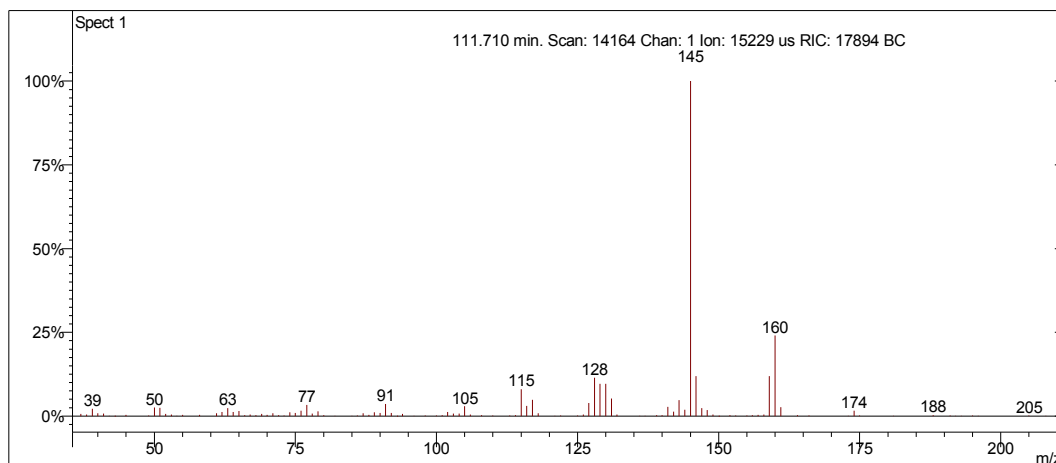
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 143$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_{11}H_{10} = C_{11}H_{11}^{+} + CH_3CN$		
$[M+1]^{+} = 143$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{+} + CH_3OH = CH_3OH_2^{+} + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^{+} + C_{11}H_{10} = C_{11}H_{11}^{+} + CH_3OH$		

Desconhecido 98

Amostra de Gasolina Comum

Scan 14164 from d:\lilian\doutorado\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from d:\... \gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 14164, Time: 111.710 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 111.710 min. Scan: 14164 Chan: 1 Ion: 15229 us RIC: 17894 BC
Pair Count: 115 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

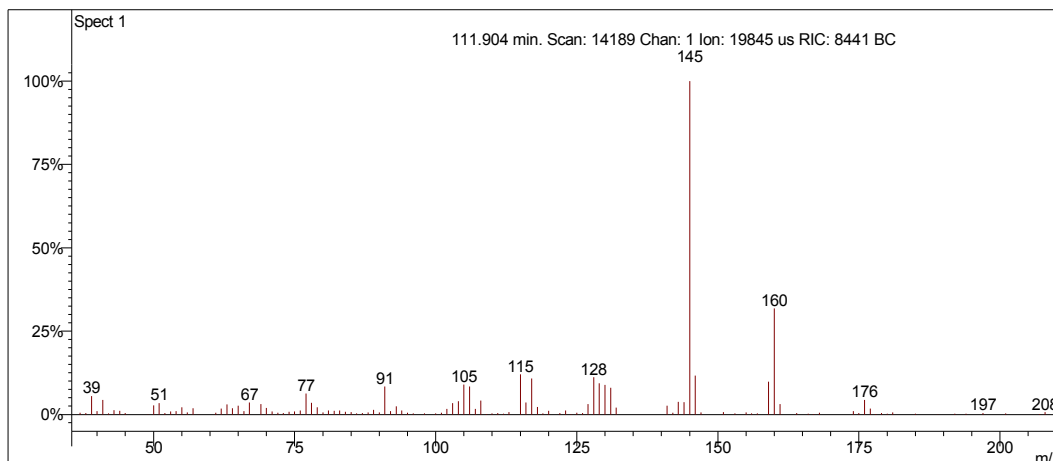
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
160	$[M]^+ = C_{12}H_{16}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
145	$C_{11}H_{13}^+$	Perda de metila.
131	$C_{10}H_{11}^+$	Perda de etila.
117	$C_9H_{11}^+$	Perda de propila.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 12 carbonos.		

Desconhecido 99

Amostra de Gasolina Comum

Scan 14189 from d:\lilian\doutorado\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from d:\... \gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
 Scan No: 14189, Time: 111.904 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 111.904 min. Scan: 14189 Chan: 1 Ion: 19845 us RIC: 8441 BC
 Pair Count: 129 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

Interpretação do Fragmentograma

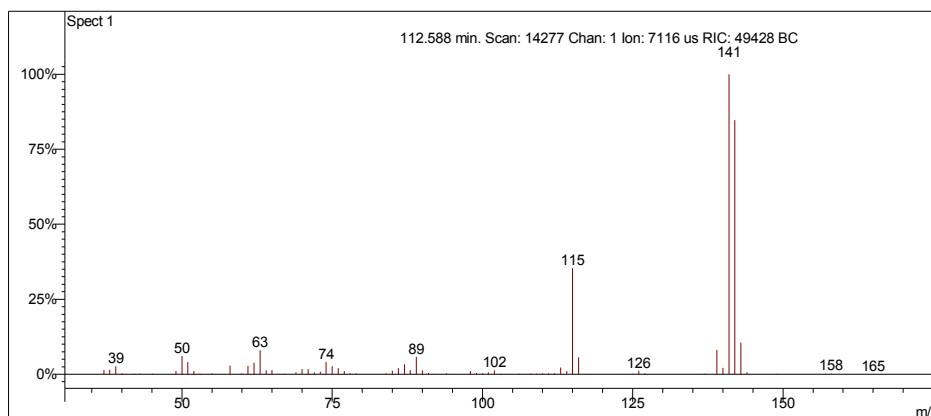
Íon m/z	Fragmento	Observação
160	$[M]^{+} = C_{12}H_{16}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
145	$C_{11}H_{13}^{+}$	Perda de metila.
131	$C_{10}H_{11}^{+}$	Perda de etila.
117	$C_9H_9^{+}$	Perda de propila.
91	$C_7H_7^{+}$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.

Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 12 carbonos, coelui com outra substância.

1-metilnaftaleno

Amostra de Gasolina Comum

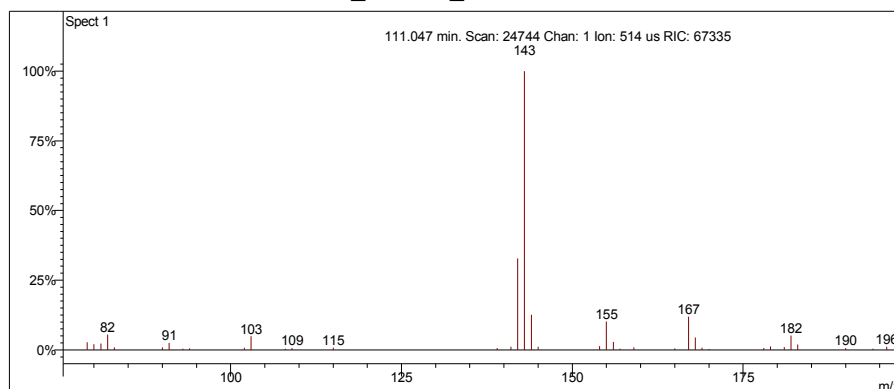
Scan 14277 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 14277, Time: 112.588 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 112.588 min. Scan: 14277 Chan: 1 Ion: 7116 us RIC: 49428 BC
Pair Count: 97 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

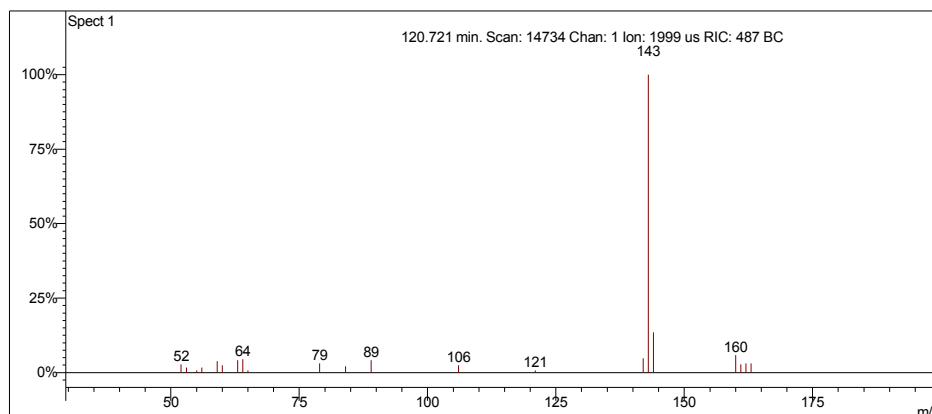
Scan 24744 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 24744, Time: 111.047 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 111.047 min. Scan: 24744 Chan: 1 Ion: 514 us RIC: 67335
Pair Count: 46 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Ionização Química com Metanol

Scan 14734 from c:\... \amostras\cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gpadci7-31-02_10;26;30 am.sms
 Scan No: 14734, Time: 120.721 minutes
 No averaging. Background corrected.
 Comment: 120.721 min. Scan: 14734 Chan: 1 Ion: 1999 us RIC: 487 BC
 Pair Count: 21 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 200

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
142	$[M]^{++} = C_{11}H_{10}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica..
141	$[M-1]^+ = C_{11}H_9^+$	Perda de hidrogênio.
126	$C_{10}H_6^+$	Perda de metano.
115	$C_9H_7^+$	Perda de C_2H_3 com rearranjo de hidrogênio.

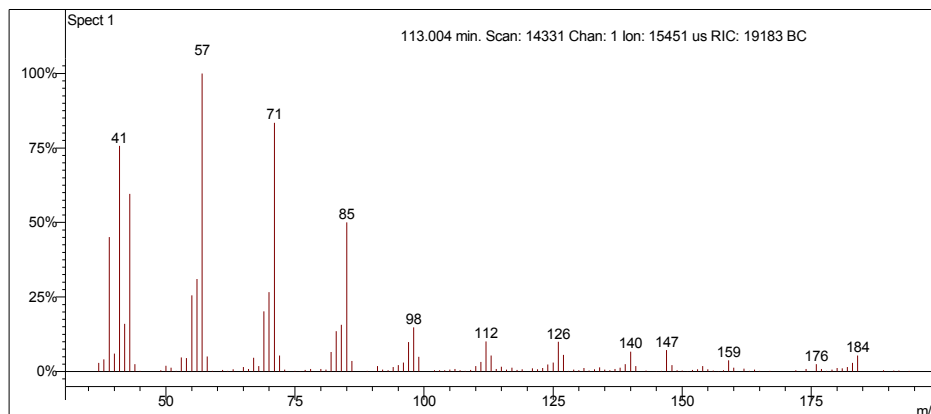
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 143$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{++} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_{11}H_{10} = C_{11}H_{11}^+ + CH_3CN$		
$[M+1]^+ = 143$	Transferência de próton.	Metanol
$CH_3OH^{++} + CH_3OH = CH_3OH_2^+ + \cdot CH_2OH$ $CH_3OH_2^+ + C_{11}H_{10} = C_{11}H_{11}^+ + CH_3OH$		

Tridecano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 14331 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 14331, Time: 113.004 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 113.004 min. Scan: 14331 Chan: 1 Ion: 15451 us RIC: 19183 BC
Pair Count: 139 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

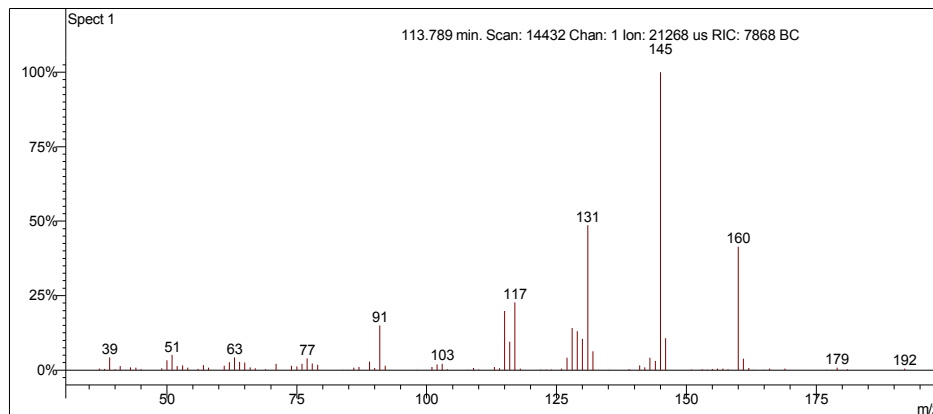
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
184	$[M]^{++} = C_{13}H_{28}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
126	$C_9H_{18}^+$	Perda de butano.
112	$C_8H_{16}^+$	Perda de pentano.
98	$C_7H_{14}^+$	Fragmentação alílica.
85	$C_6H_{13}^+$	Fragmentação alílica.
71	$C_5H_{11}^+$	Fragmentação alílica.
57	$C_4H_9^+$	Fragmentação alílica.

Desconhecido 100

Amostra de Gasolina Comum

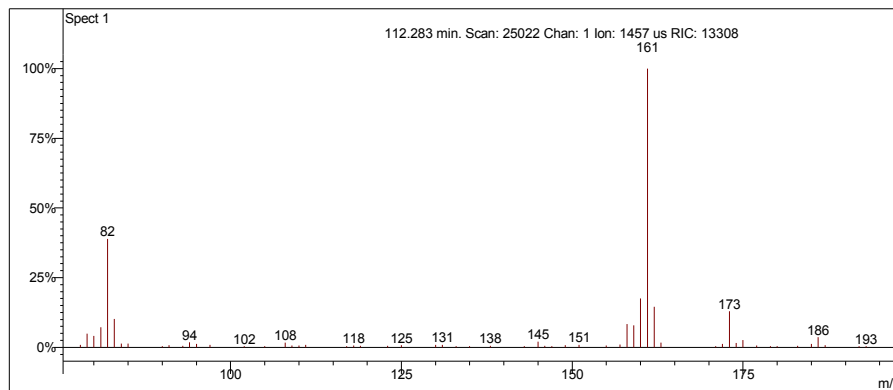
Scan 14432 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 14432, Time: 113.789 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 113.789 min. Scan: 14432 Chan: 1 Ion: 21268 us RIC: 7868 BC
Pair Count: 106 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 25022 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 25022, Time: 112.283 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 112.283 min. Scan: 25022 Chan: 1 Ion: 1457 us RIC: 13308
Pair Count: 79 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
160	$[M]^+ = C_{12}H_{16}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
145	$C_{11}H_{13}^+$	Perda de metila.
131	$C_{10}H_{11}^+$	Perda de etila.
117	$C_9H_9^+$	Perda de propila.
91	$C_7H_7^+$	Formação de íon tropílio, com perda de hidrogênio, caracterizando aromático substituído.
77	$C_6H_5^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
63	$C_5H_3^+$	
Conclusão: a substância é um aromático ramificado com 12 carbonos.		

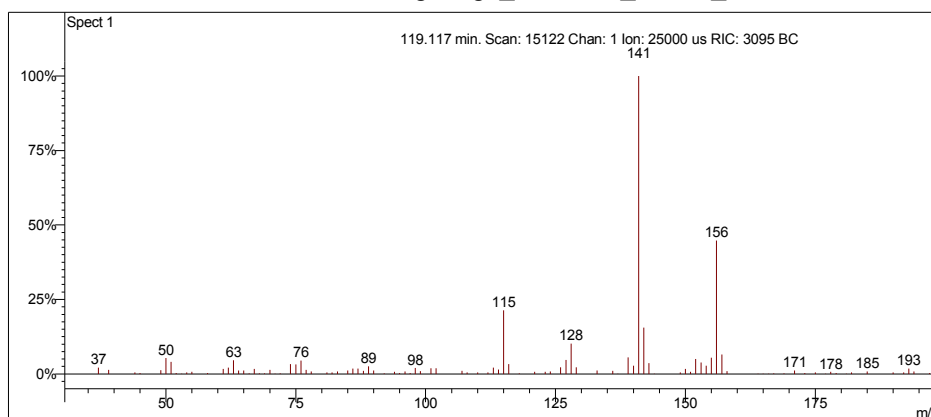
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 161$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+\bullet} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \bullet CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_{12}H_{16} = C_{12}H_{16}^+ + CH_3CN$		
Sem sinal		Metanol

Desconhecido 101

Amostra de Gasolina Comum

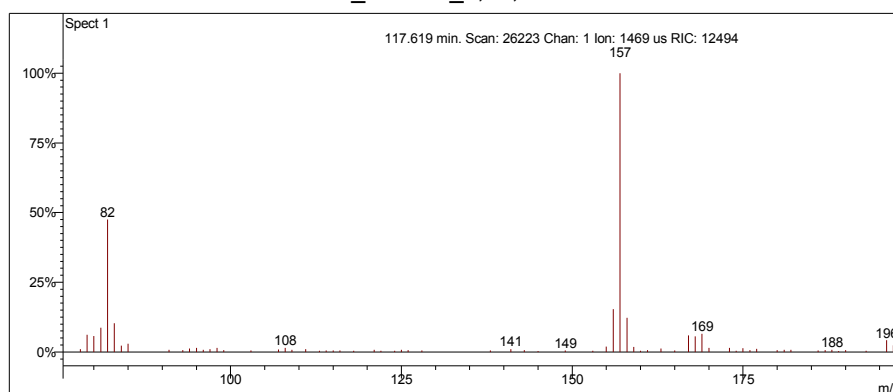
Scan 15122 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 15122, Time: 119.117 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 119.117 min. Scan: 15122 Chan: 1 Ion: 25000 us RIC: 3095 BC
Pair Count: 127 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 26223 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 26223, Time: 117.619 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 117.619 min. Scan: 26223 Chan: 1 Ion: 1469 us RIC: 12494
Pair Count: 93 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
156	$[M]^{+\bullet} = C_{12}H_{12}^{+\bullet}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica..
141	$[M-15]^{+\bullet} = C_{11}H_9^{+\bullet}$	Perda de metila.
128	$C_{10}H_8^{+\bullet}$	Perda de eteno.
115	$C_9H_7^{+\bullet}$	
76	$C_6H_4^{+\bullet}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
63	$C_5H_3^{+\bullet}$	Perda de acetileno do íon tropílio.
Conclusão: a substância é um aromático condensado e ramificado com 12 carbonos.		

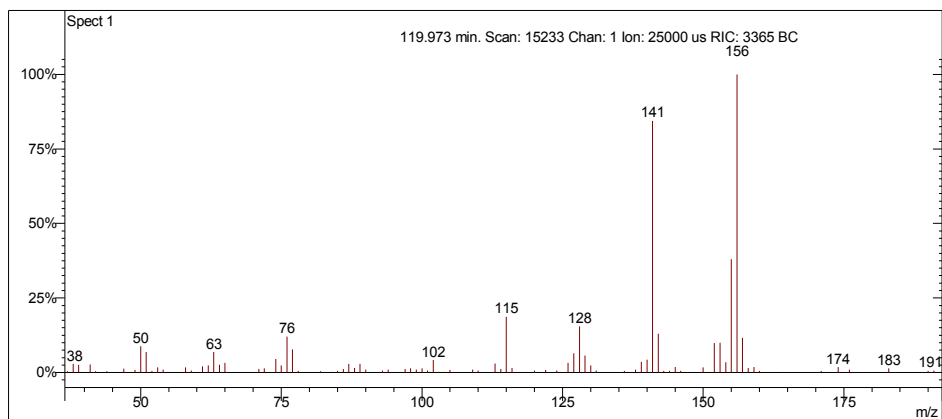
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+\bullet} = 157$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+\bullet} + CH_3CN = CH_3CNH^{+\bullet} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+\bullet} + C_{12}H_{12} = C_{12}H_{13}^{+\bullet} + CH_3CN$		
Sem sinal		Metanol

2,6-dimetilnaftaleno

Amostra de Gasolina Comum

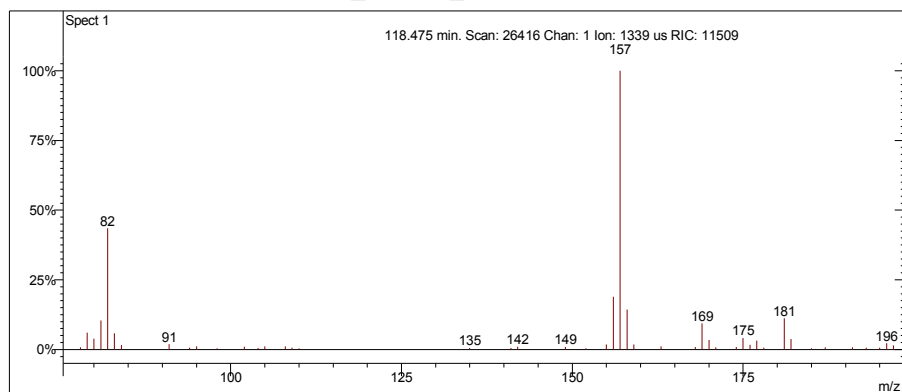
Scan 15233 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 15233, Time: 119.973 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 119.973 min. Scan: 15233 Chan: 1 Ion: 25000 us RIC: 3365 BC
Pair Count: 110 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 26416 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 26416, Time: 118.475 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 118.475 min. Scan: 26416 Chan: 1 Ion: 1339 us RIC: 11509
Pair Count: 66 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
156	$[M]^+ = C_{12}H_{12}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica..
141	$[M-15]^+ = C_{11}H_9^+$	Perda de metila.
128	$C_{10}H_8^+$	Perda de etano.
115	$C_9H_7^+$	
76	$C_6H_4^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
63	$C_5H_3^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.

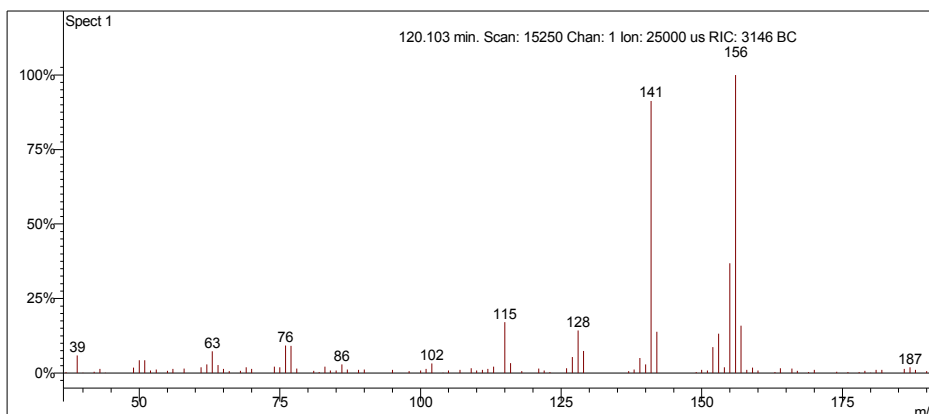
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 157$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+\bullet} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \bullet CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_{12}H_{12} = C_{12}H_{13}^+ + CH_3CN$		
Sem sinal		Metanol

2,7-dimetilnaftaleno

Amostra de Gasolina Comum

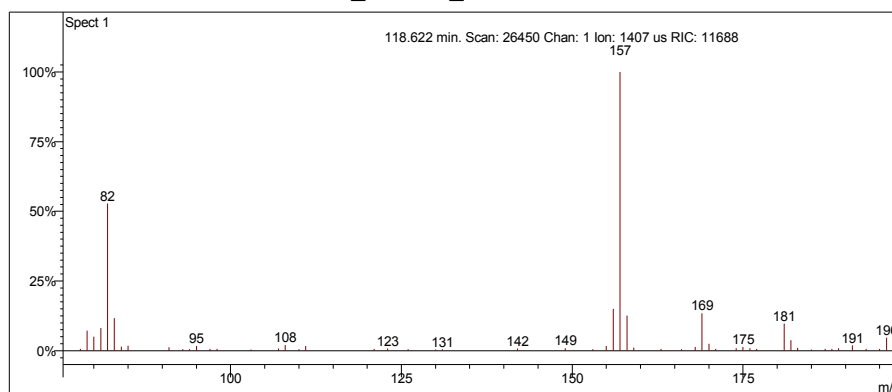
Scan 15250 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 15250, Time: 120.103 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 120.103 min. Scan: 15250 Chan: 1 Ion: 25000 us RIC: 3146 BC
Pair Count: 118 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 26450 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 26450, Time: 118.622 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 118.622 min. Scan: 26450 Chan: 1 Ion: 1407 us RIC: 11688
Pair Count: 89 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
156	$[M]^+ = C_{12}H_{12}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica..
141	$[M-15]^+ = C_{11}H_9^+$	Perda de metila.
128	$C_{10}H_8^+$	Perda de eteno.
115	$C_9H_7^+$	
76	$C_6H_4^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
63	$C_5H_3^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.

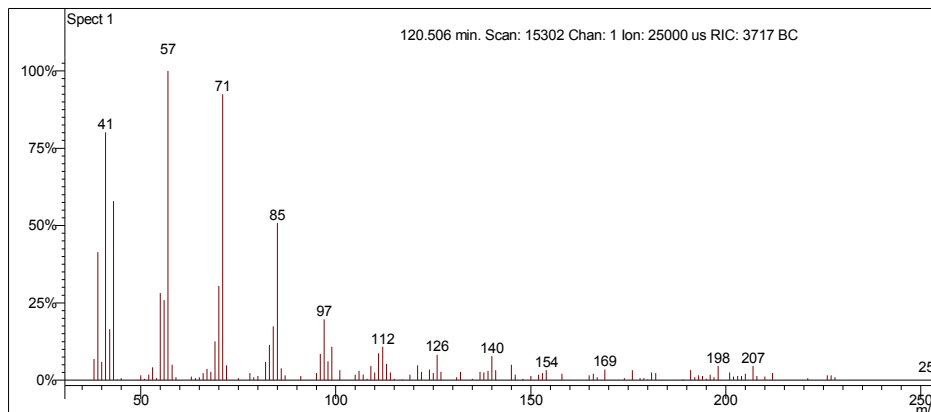
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 157$	Transferência de próton.	Acetonitrila
	$CH_3CN^{+\bullet} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \bullet CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_{12}H_{12} = C_{12}H_{13}^+ + CH_3CN$	
Sem sinal		Metanol

Tetradecano

Amostra de Gasolina Comum

Scan 15302 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 15302, Time: 120.506 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 120.506 min. Scan: 15302 Chan: 1 Ion: 25000 us RIC: 3717 BC
Pair Count: 121 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila e Metanol

Ionização química instável.

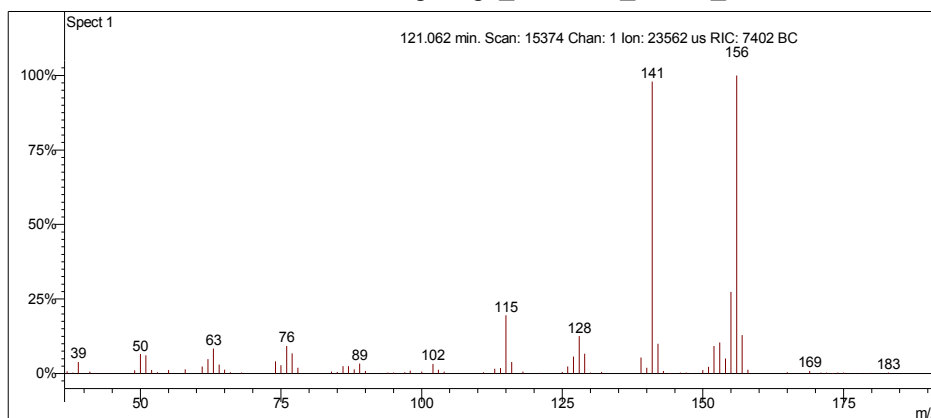
Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
198	$[M]^+ = C_{14}H_{30}^+$	Íon molecular de baixa intensidade indica molécula linear ou muito ramificada.
126	$C_9H_{18}^+$	Perda de pentano.
112	$C_8H_{16}^+$	Fragmentação alílica.
97	$C_7H_{13}^+$	Fragmentação alílica.
85	$C_6H_{13}^+$	Fragmentação alílica.
71	$C_5H_{11}^+$	Fragmentação alílica.
57	$C_4H_9^+$	Fragmentação alílica.

1,3-dimetilnaftaleno

Amostra de Gasolina Comum

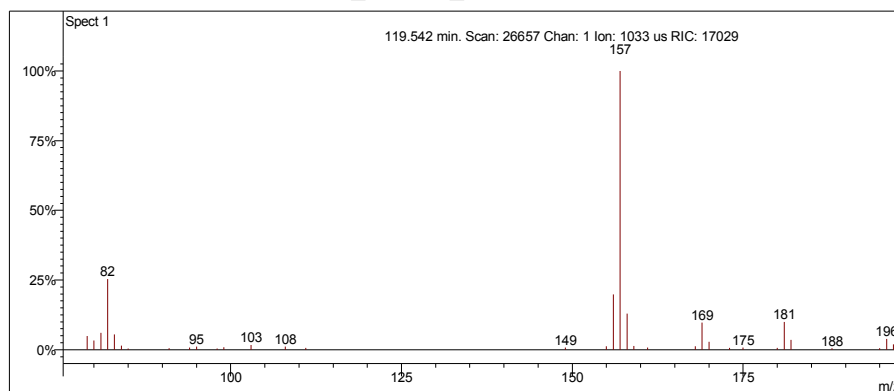
Scan 15374 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 15374, Time: 121.062 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 121.062 min. Scan: 15374 Chan: 1 Ion: 23562 us RIC: 7402 BC
Pair Count: 117 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 26657 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 26657, Time: 119.542 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 119.542 min. Scan: 26657 Chan: 1 Ion: 1033 us RIC: 17029
Pair Count: 51 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
156	$[M]^+ = C_{12}H_{12}^+$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
141	$[M-15]^+ = C_{11}H_9^+$	Perda de metila.
128	$C_{10}H_8^+$	Perda de eteno.
115	$C_9H_7^+$	
76	$C_6H_4^+$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
63	$C_5H_3^+$	Perda de acetileno do íon tropílio.

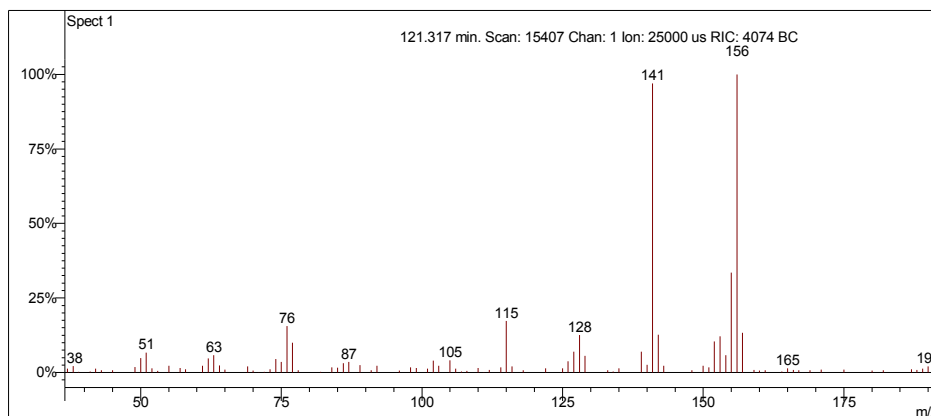
Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^+ = 157$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+\bullet} + CH_3CN = CH_3CNH^+ + \bullet CH_2CN$ $CH_3CNH^+ + C_{12}H_{12} = C_{12}H_{13}^+ + CH_3CN$		
Sem sinal		Metanol

1,2-dimetilnaftaleno

Amostra de Gasolina Comum

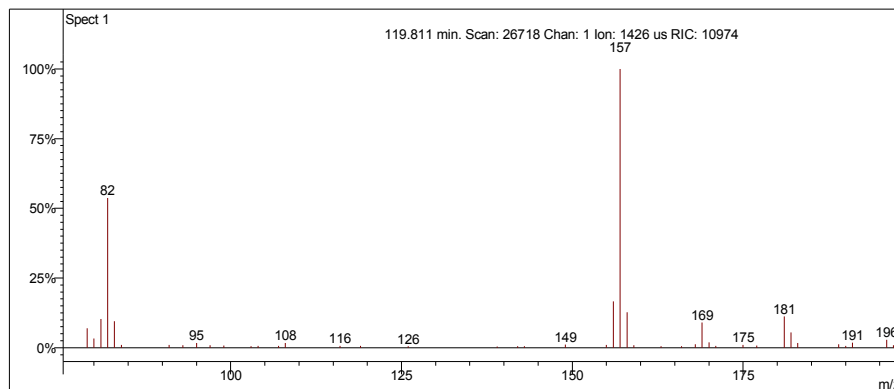
Scan 15407 from c:\... \amostras\cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms



Spectrum from c:\... \cgms\gc_aditivada_4-6-05_10;00;33 am.sms
Scan No: 15407, Time: 121.317 minutes
No averaging. Background corrected.
Comment: 121.317 min. Scan: 15407 Chan: 1 Ion: 25000 us RIC: 4074 BC
Pair Count: 114 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 30 - 300

Ionização Química com Acetonitrila

Scan 26718 from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS



Spectrum from D:\GCOMUM_11-1-06_2;38;30 PM.SMS
Scan No: 26718, Time: 119.811 minutes
No averaging. Not background corrected.
Comment: 119.811 min. Scan: 26718 Chan: 1 Ion: 1426 us RIC: 10974
Pair Count: 67 MW: 0 Formula: None CAS No: None Acquired Range: 20 - 300

Interpretação do Fragmentograma

Íon m/z	Fragmento	Observação
156	$[M]^{+} = C_{12}H_{12}^{+}$	Íon molecular de alta intensidade indica molécula com ressonância ou cíclica.
141	$[M-15]^{+} = C_{11}H_9^{+}$	Perda de metila.
128	$C_{10}H_8^{+}$	Perda de eteno.
105	$C_8H_{10}^{+}$	Formação do íon tropílio substituído.
76	$C_6H_4^{+}$	Perda da ramificação e formação do íon benzílico.
63	$C_5H_3^{+}$	Perda de acetileno do íon tropílio.

Interpretação Ionização Química

Íon m/z	Reação	Substância
$[M+1]^{+} = 157$	Transferência de próton.	Acetonitrila
$CH_3CN^{+} + CH_3CN = CH_3CNH^{+} + \cdot CH_2CN$ $CH_3CNH^{+} + C_{12}H_{12} = C_{12}H_{13}^{+} + CH_3CN$		
Sem sinal		Metanol