

APLICAÇÃO DE PÓS-PROCESSAMENTO COM O SOFTWARE METALIGN DE DADOS OBTIDOS POR GC-MS EM REAÇÕES DE OXIDAÇÕES DE HERBICIDAS TRIAZÍNICOS: RESULTADOS PRELIMINARES

BASSOLI, José Domingos¹; MEDEIROS, Maria Aparecida Carvalho de²

¹ Mestrando em Tecnologia, FT-Unicamp, Limeira, SP, bassolidomingos@yahoo.com.br.

² Professora Doutora, FT-Unicamp, Limeira, SP, mariaacm@ft.unicamp.br.

RESUMO - Devido a complexidade das análises de amostras geradas através do software X-CaliburTM *via* Cromatografia Gasosa/Espectrometria de Massas, tais como as reações de degradação de herbicidas triazínicos (GUPTA, 2012), se faz necessário o uso de softwares, como o MetAlign (LOMMEN, 2012), que permitem a otimização do pré-processamento e também a exportação dos dados, viabilizando o tratamento estatístico e a análise multivariável. Neste contexto, o presente trabalho tem por objetivo a otimização dos dados obtidos nas reações de oxidação de herbicidas triazínicos (atrazina e simazina) catalisadas por metaloporfirinas de rutênio e de ferro de segunda geração, utilizando o peróxido de hidrogênio como oxidante, utilizando a cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (GC-MS). Estes dados serão otimizados, aplicando-se o software MetAlign, efetuando-se a exportação dos dados obtidos no software X-CaliburTM e posterior tratamento estatístico, facilitando a obtenção dos dados processados com maior rapidez e inclusive com o software X-CaliburTM sendo visualizado como um sistema multiusuário, garantindo maior segurança dos dados obtidos pelos usuários com o sistema cromatográfico existente na FT-UNICAMP. Os resultados preliminares, aplicando-se o reprocessamento com o software MetAlign para os dados cromatográficos obtidos com o software X-CaliburTM, evidenciaram uma melhor relação sinal/ruído para os picos cromatográficos dos analitos (herbicidas triazínicos), entretanto, este trabalho está em andamento, buscando-se ampliar os resultados otimizados também para os subprodutos de degradação,

Palavras-chave: Software MetAlign, Software X-CaliburTM, Oxidação de Triazinas, GC-MS

REFERÊNCIAS

GUPTA, P. K.; Toxicity of Herbicides. Elsevier, Veterinary Toxicology (Second Edition), Pages 631–652, 2012.

LOMMEN, A, HJ Kools ; MetAlign 3.0: performance enhancement by efficient use of advances in computer hardware_- Metabolomics, 2012 – Springer.