

# Monitoramento dos compostos fenólicos gerados no processamento de biomassa lignocelulósica por técnicas de espectroscopia associadas à análise multivariada de dados

*Ariane Silveira Sbrice Pinto<sup>1</sup>*  
*Marcelo Perencin de Arruda Ribeiro<sup>2</sup>*  
*Cristiane Sanchez Farinas<sup>3</sup>*

<sup>1</sup> Aluna de mestrado em Engenharia Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP. Bolsista CNPq, Embrapa Instrumentação, São Carlos, SP; ariane\_sbrice@hotmail.com.

<sup>2</sup> Professor do Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP.

<sup>3</sup> Pesquisadora da Embrapa Instrumentação, São Carlos, SP.

Um dos principais desafios do processo de produção do etanol de segunda geração (2G) está relacionado à caracterização dos hidrolisados da biomassa lignocelulósica, que, frequentemente, contêm quantidades elevadas de compostos fenólicos que inibem e desativam enzimas, além de influenciarem negativamente a etapa de fermentação. A quantificação destes compostos aromáticos pode ajudar a compreender as limitações dos bioprocessos envolvidos, viabilizando, assim, o desenvolvimento de processos mais eficientes, robustos e tolerantes a estes compostos. A aplicação de tecnologias rápidas, eficientes e de baixo custo no monitoramento dos compostos fenólicos possibilitaria o melhor controle das etapas de pré-tratamento, hidrólise e fermentação, com atuações estratégicas de acordo com a concentração desses inibidores. O uso das técnicas de espectroscopia associada à análise multivariada de dados é uma ferramenta quimiométrica que pode ser utilizada no monitoramento destes compostos. Nesse trabalho, a utilização de técnicas espectrométricas na região do Ultravioleta Visível (UV-vis) bem como do Infravermelho Próximo (do inglês, *Near Infrared- NIR*) associadas à técnica regressão por mínimos quadrados parciais (do inglês, *Partial Least Squares-PLS*) foram avaliadas no monitoramento de compostos fenólicos originados no processo de pré-tratamento dos resíduos lignocelulósicos da cana-de-açúcar. Para a calibração multivariada do modelo, utilizaram-se amostras sintéticas contendo três compostos fenólicos: vanilina, ácidos gálico e p-cumárico diluídos em solução de etanol-água. Os modelos PLS-NIR testados apresentaram erros de previsão (RMSECV) em torno de 20%, indicando a necessidade de um aprimoramento para a quantificação dos compostos analisados. Enquanto que, para os modelos PLS-UVvis, o RMSECV foi em torno de 10% para os ácidos gálico e p-cumárico. Assim, o monitoramento qualitativo destes ácidos pode ser realizado a partir de conjuntos de calibração formado de amostras sintéticas em conjunto com PLS-UVvis. Além disso, foi possível realizar a triagem dos comprimentos de onda mais significativos na faixa espectral do UV-visível. Este resultado viabiliza a seleção de comprimentos de onda específicos a serem utilizados na calibração de modelos baseados em amostras reais do processo de pré-tratamento dos resíduos lignocelulósicos da cana-de-açúcar.

**Apoio financeiro:** Cnpq, Embrapa, FAPESP

**Área:** Tecnologia da Biomassa

**Palavras-chave:** compostos fenólicos, etanol de segunda geração, espectroscopia no infravermelho próximo (NIR), espectroscopia no ultravioleta visível (UV-vis), regressão por mínimos quadrados parciais (PLS).